



ЛАБОРАТОРИИ
МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА
В РОССИИ

2015-2016

ОГЛАВЛЕНИЕ

С ЗАПАДА НА ВОСТОК

Предисловие	4
-------------------	---

КАЛИНИНГРАД

Балтийский федеральный университет им. И. Канта <i>Лаборатория магнитно-резонансных методов исследования вещества (Г.С. Куприянова)</i>	5
--	---

САНКТ-ПЕТЕРБУРГ

Санкт-Петербургский государственный университет <i>Ресурный центр «Магнитно-резонансные методы исследования» (П.М. Толстой)</i>	15
<i>Отдел квантовых магнитных явлений (В.И. Чижик)</i>	28
<i>Лаборатория биомолекулярного ЯМР (Н.Р. Скрынников)</i>	42
Российский государственный педагогический университет <i>Лаборатория «Спектроскопия ядерного магнитного резонанса» (С.В. Макаренко)</i>	45

МОСКВА

Институт биоорганической химии им. акад. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН <i>Лаборатория биомолекулярной ЯМР спектроскопии (А.С. Арсеньев)</i>	47
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова <i>Центр магнитной томографии и спектроскопии (А.Р. Хохлов, В.И. Польшаков)</i>	54

ЧЕРНОГОЛОВКА

Институт проблем химической физики РАН <i>Лаборатория ядерного магнитного резонанса (В.И. Волков)</i>	70
--	----

РОСТОВ-НА-ДОНУ

Южный федеральный университет <i>Центр коллективного пользования «Молекулярная спектроскопия» (Г.С. Бородкин)</i>	80
--	----

КАЗАНЬ

Казанский (Приволжский) федеральный университете <i>Международный центр магнитного резонанса (А.В. Аганов)</i>	84
<i>Группа магнитно-резонансной томографии (К.А. Ильясов)</i>	84
<i>Группа ЯМР спектроскопии высокого разрешения (В.В. Клочков)</i>	85
<i>Группа градиентного ЯМР и микротомографии (В.Д. Скирда)</i>	86
<i>Группа мультіядерного магнитного резонанса при низких температурах (М.С. Тагиров)</i>	87
<i>Группа электронного парамагнитного резонанса (С.Б. Орлинский)</i>	88
Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского РАН <i>ЭПР-центр (К.М. Салихов)</i>	98

УФА

Институт нефтехимии и катализа РАН	
<i>Лаборатория структурной химии (Л.М. Халилов)</i>	108
Уфимский институт химии РАН	
<i>Лаборатория физико-химических методов анализа (Л.В. Спирихин)</i>	123

ЕКАТЕРИНБУРГ

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина	
<i>Лаб. комплексных исследований и экспертной оценки органических материалов (О.С. Ельцов)</i>	128

НОВОСИБИРСК

Международный томографический центр СО РАН	
<i>Отдел магнитных и спиновых явлений (Р.З. Сагдеев)</i>	134
<i>Лаборатория магнитно-резонансной микротомографии (И.В. Коптюг)</i>	135
<i>Группа фотохимических радикальных реакций (А.В. Юрковская)</i>	141
<i>Группа спиновой динамики (К.Л. Иванов)</i>	141
<i>Лаборатория магнитного резонанса (М.В. Федин)</i>	150
Институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН	
<i>Лаборатория физических методов исследования (Е.Г. Багрянская)</i>	155
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН	
<i>Группа ЯМР спектроскопии в твердом теле (О.Б. Лапина)</i>	163
<i>Группа ЯМР спектроскопии каталитических превращений углеводов (А.Г. Степанов)</i>	170
<i>Группа электронного магнитного резонанса (О.Н. Мартыанов)</i>	179
Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН	
<i>Лаборатория химии и физики свободных радикалов (С.А. Дзюба, Ю.Д. Цветков, Л.В. Кулик)</i>	188
<i>Лаборатория быстротекущих процессов (В.А. Багрянский, Ю.Н. Молин)</i>	193

ВЛАДИВОСТОК

Институт химии Дальневосточного отделения РАН	
<i>Лаборатория химической радиоспектроскопии (В.Я. Кавун)</i>	198
Некоторые лаборатории, не вошедшие в сборник	204
Алфавитный указатель фамилий	206

ПРЕДИСЛОВИЕ

Уважаемые коллеги!

Перед вами сборник «Лаборатории магнитного резонанса в России 2015-2016» – неформальная брошюра для свободного распространения, в создании которой приняли участие 32 лаборатории из 10-ти городов России. На карте внизу страницы точками указано примерное расположение этих лабораторий. Чем больше точек, тем больше участников из этого города прислали свои данные для сборника. Конечно, профильных лабораторий и отдельных специалистов в области магнитного резонанса в России значительно больше, так что список можно продолжать, и я надеюсь, что в дальнейшем получится собрать еще больше материала.

Назначение сборника – дать специалистам и всем заинтересованным представление о том, где в России находятся «точки роста», где расположено оборудование и какие исследования ведутся в области ЯМР, ЭПР, МРТ, ЯКР. Нам представляется, что этот материал позволит при необходимости выбрать оборудование под конкретную задачу, лабораторию для стажировки или специалиста для консультаций.

Я хочу поблагодарить всех участников сборника за подготовку материалов и за готовность помочь. Первыми откликнувшимися и поддержавшими идею были А.В. Аганов и А.С. Арсеньев, за что им отдельное спасибо. С составлением списка лабораторий сильно помогли также И.В. Коптюг и К.Л. Иванов. В первоначальной редакции помогли сотрудники РЦ «Магнитно-резонансные методы исследования» СПбГУ. В остальном список благодарностей фактически совпадает с оглавлением.

С уважением,
Петр Толстой



Магнитный резонанс в Балтийском Федеральном Университете им. И.Канта.

ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ

1. Ядерный квадрупольный резонанс. Новые подходы для изучения размерных эффектов, поверхностной диффузии, стекол и магнитоупорядоченных образцов; идентификация азотосодержащих соединений (лекарственных препаратов, взрывчатых веществ)
2. ЯМР высокого разрешения
3. ЯМР в слабом магнитном поле
4. Развитие методов цифровой обработки ЯКР/ЯМР сигналов с целью увеличения чувствительности методов ЯКР/ЯМР
5. Развитие методов ЭПР и ФМР для исследования наноразмерных структур.

МЕСТОПОЛОЖЕНИЕ

ФГАОУ ВО «Балтийский федеральный университет
имени Иммануила Канта»
236016, г. Калининград, ул. А. Невского, д. 14
+ 7 (4012) 33-82-17



Корпус физико-технического института БФУ им. И. Канта



Спектрометр ЯМР Varian 400

Прибор для измерений 1D и 2D спектров ЯМР жидкостей и твердых тел.

Датчики прямого и инверсного наблюдения.



Спектрометр ЯМР/ ЯКР Тесмаг

Прибор для исследования сигналов ЯКР/ЯМР, 1D и 2D спектров в области частот от 1 до 400 МГц в жидкостях и твердых телах. В состав прибора входят Apollo-двойная резонансная ЯКР/ЯМР консоль, линейные усилители мощности в области частот 0.25–12 МГц, 5–200 МГц; двухчастотный датчик; одночастотный датчик с подстройкой частоты; ЯКР низкотемпературный датчик и система термостатирования STVP-200T.



Приборный комплекс для экспериментов по косвенному ядерному квадрупольному резонансу.



Модернизированный ЭПР спектрометр фирмы «Радиопан» с поворотным устройством (гониометром) в двух плоскостях, с цифровой обработкой сигналов.

ИССЛЕДОВАТЕЛИ В ОБЛАСТИ МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА



Куприянова Галина Сергеевна, д.ф.-м.н., профессор кафедры радиофизики и информационной безопасности.

Область интересов: проблемы релаксации в ЯМР/ЯКР; кросс-корреляционные и кросс-релаксационные эффекты; исследование размерных эффектов; ФМР в наноструктурах.



Синявский Николай Яковлевич, д.ф.-м.н., профессор кафедры радиофизики и информационной безопасности.

Область интересов: нутационная ЯКР спектроскопия, развитие новых методов ЯКР/ЭПР для исследования неупорядоченных структур, двумерная релаксометрия ЯКР и исследование диффузии ядерной намагниченности в микрокристаллах.



Шпилевой Андрей Алексеевич, к. ф.-м. наук, директор физико-технического института.

Область интересов: косвенные методы регистрации сигналов ЯКР, развитие техники и методики регистрации сигналов ядерного квадрупольного резонанса в поликристаллических соединениях, в том числе с помощью двойного ядерного магнитного - ядерного квадрупольного резонанса.



Мершиев Иван Георгиевич, ассистент кафедры радиофизики и информационной безопасности.

Область интересов: цифровая обработка сигналов; разработка новых методов детектирования в ЯКР; стохастический резонанс в ЯКР.



Богайчук Александр Вячеславович, аспирант кафедры радиофизики и информационной безопасности.

Область интересов: ЯМР в биологических жидкостях; ЯМР 2H, 1H, релаксация; изучение обменных процессов в присутствии квадрупольного ядра.



Орлова Анна Николаевна, аспирантка кафедры радиофизики и информационной безопасности.

Область интересов: ФМР в наноструктурах, спинтроника.



Мамадазиев Султоназар, аспирант кафедры радиофизики и информационной безопасности.

Область интересов: Развитие новых подходов идентификации азотосодержащих соединений двухчастотными методами ЯКР.



Северин Евгений Александрович

Область интересов: ЯМР в слабом магнитном поле; развитие методов идентификации опасных жидкостей; ЯМР релаксация.



Молчанов Виталий Владимирович

Область интересов: ЯМР в слабом магнитном поле; развитие методов идентификации опасных жидкостей; ЯМР релаксация.



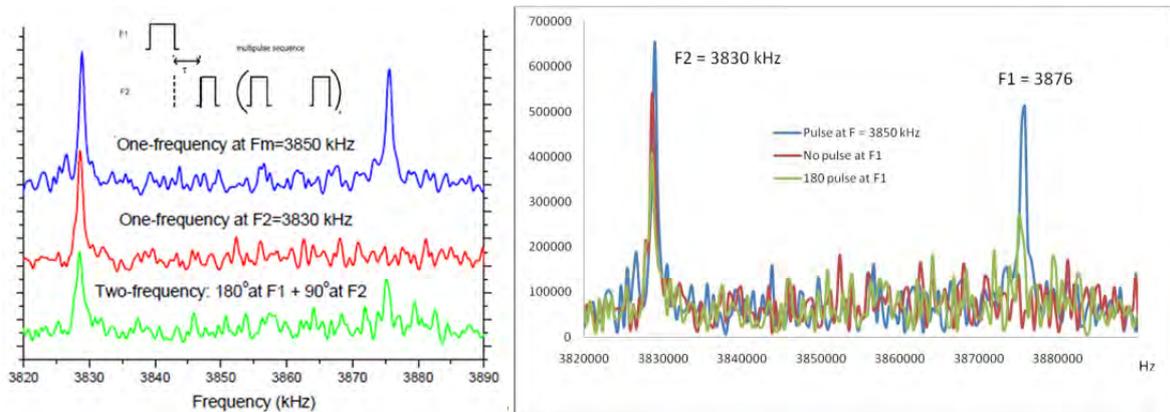
Бурмистров Валерий Иванович, преп. каф. телекоммуникаций физико-технического института.

Область интересов: Устройства СВЧ диапазона; цифровая обработка сигналов, развитие техники и методики регистрации сигналов ЯКР в поликристаллических соединениях, в том числе с помощью двойного ядерного магнитного - ядерного квадрупольного резонанса.

КЛЮЧЕВЫЕ РАБОТЫ

Методы ЯКР по идентификации лекарственных препаратов

G.V.Mozzhukhin, J.Barras, G.S. Kupriyanova, V.Z.Rameev Two-Frequency Nuclear Resonance for Line Identification. Applied Magnetic Resonance. V.45, N12 2015, p. 261-165.



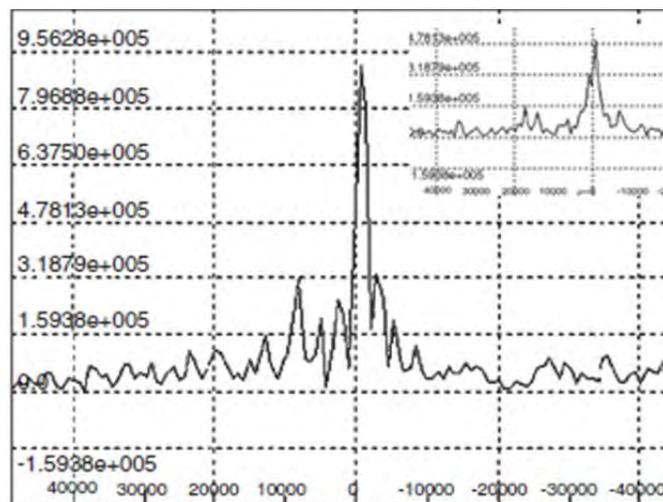
Фрагмент ЯКР спектра карбамазерина, полученный с использованием однокатушечного датчика при возбуждении одной и двух частот с $F1 = 3876 \text{ kHz}$ и $F2 = 3852 \text{ kHz}$.

Аналитические выражения для сигналов при регистрации на одной катушке

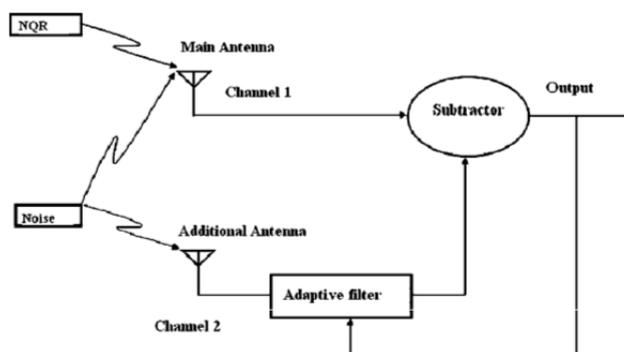
$$\langle I_y \rangle \propto \left| E_+ \frac{A^2 t_p^2}{\alpha^2} (\cos \alpha - 1) + E_0 \cos \alpha \right| + \left| 2 \frac{B}{\omega_0 \alpha} \sin \alpha \sin \frac{\omega_0 t_p}{2} \sin \left(\omega_0 (t - t_p) + \frac{\omega_0 t_p}{2} \right) \right|$$

$$\langle I_z \rangle \propto 2 \frac{AB t_p}{\alpha^2 \omega_0} \left\{ \begin{aligned} & E_+ \frac{(\cos \alpha - 1)}{\alpha^2} \left(A^2 t_p^2 \cos \alpha + \frac{4B^2}{\omega_0^2} \sin^2 \frac{\omega_0 t_p}{2} \right) + \\ & + E_- \frac{(\cos \alpha - 1)}{\alpha^2} \left[A^2 t_p^2 + \frac{4B^2}{\omega_0^2} \sin^2 \frac{\omega_0 t_p}{2} \cos \alpha \right] + E_0 \sin^2 \alpha \end{aligned} \right\} \times \sin \frac{\omega_0 t_p}{2} \sin \left(\omega_0 (t - t_p) - \frac{\omega_0 t_p}{2} \right)$$

Методы ЯКР по идентификации взрывчатых веществ и разработка аппаратуры для детектирования сигналов на ^{14}N .



Spectral intensity curve ^{14}N NQR for 842 kHz line obtained for the detection of 25 g of industrial TNT, registration time $t =$ of 13 min in the insert $t = 6$ min



Two-channel system for attenuation of external interfering signals and noise.

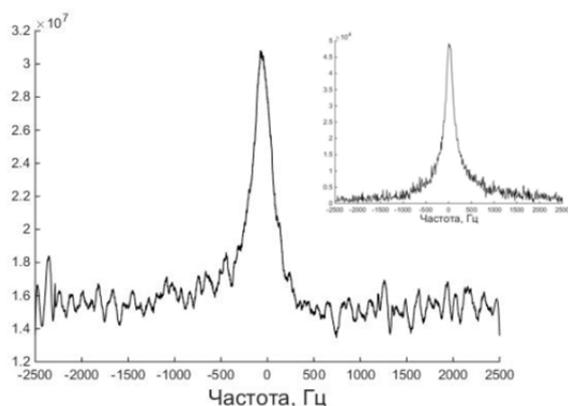


The baggage scanner developed at CRIRP.

- The main advantages of this device are the following:
1. High speed of operation.
 2. Automatic detection of explosives.
 3. Low false alarm.
 4. Scanner may be used in integrated system after some development.

G.V. Mozzhukhin, S.V. Molchanov, G.S. Kupriyanova, A.V. Bodnya, V.V. Fedotov, Hao Guoxin, Jin Yanbo, Ren Tianliang, Zhang Guojin. The Detection of Industrial Explosives by the Quadrupole Resonance Method: Some Aspects of the Detection of Ammonium Nitrate and Trinitrotoluene; In: Explosives Detection Using Magnetic and Nuclear Resonance Techniques, Springer, 2009. Ed. J. Fraissard, O. Lapina. p. 231-244.

Стохастический метод регистрации сигналов ЯКР



Сигнал ЯКР NaNO_2 , число накоплений 8. На вставке сигнал при импульсной регистрации.

Мершиев И.Г., Куприянова Г.С. Спектроскопия ЯКР ^{14}N со стохастическим возбуждением. VI-Всероссийская конференция «Новые достижения ЯМР в структурных исследованиях», сборник тезисов Казань, 2015, p. 146-147.

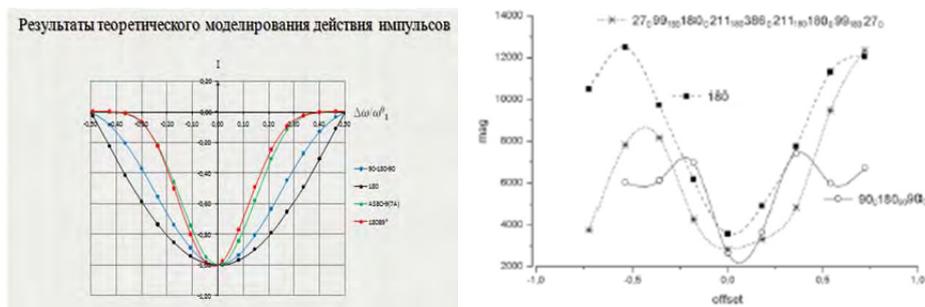
Кросс-релаксационный метод ЯКР в слабом магнитном поле направленный на увеличение чувствительности ЯКР сигналов.

G.V.Mozzhukhin, V.Z.Rameev, G.S. Kupriyanova, P.Aksu, B.Aktas. Cross- relaxation enhances NQR Ammonium Nitrite in low magnetic field. In *Magnetic Resonance Detection of Explosives and illicit Materials*. Springer 2014, p 45-59.

Метод направлен на увеличение чувствительности сигналов ЯКР, основан на укорочении времени спин-решеточной релаксации посредством применения последовательности импульсов постоянного магнитного поля.

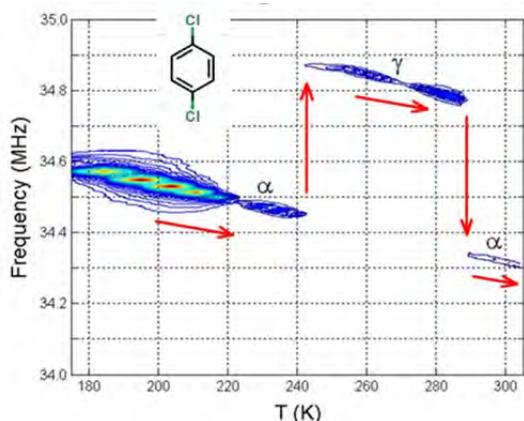
Разработка импульсных последовательностей для измерений времен релаксации в слабом неоднородном магнитном поле.

G.S.Kupriyanova, V.V.Molchanov, E.A.Severin, I.G.Mershiev. Composes pulses on inhomogeneous field NMR. In *Magnetic Resonance Detection of Explosives and illicit Materials*. Springer 2014, p.137-147



Предложены импульсные последовательности для инвертирования намагниченности в неоднородном магнитном поле, позволяющие минимизировать остаточный сигнал.

ЯКР как метод изучения фазовых процессов

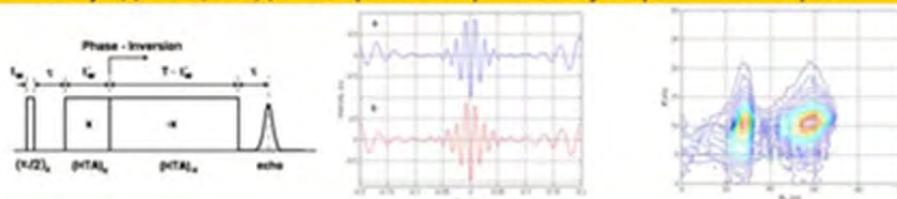


Фазовые переходы $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \alpha$ при нагревании $p\text{-C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$, предварительно охлажденного до температуры $T=77\text{ K}$.

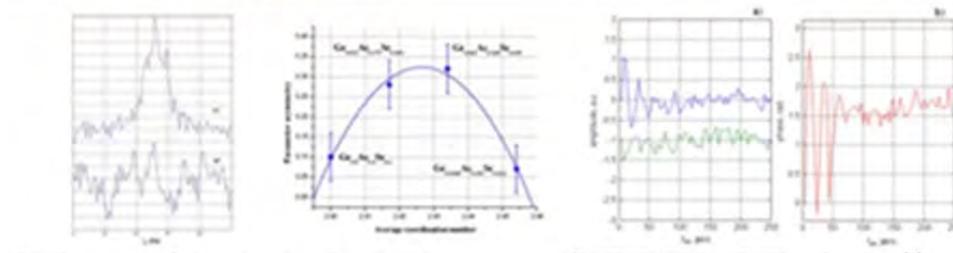
N.Ya. Sinyavsky, I. G. Mershiev, G. S. Kupriyanova The study of polymorphic states of paradichlorobenzene by means of nuclear quadrupole resonance relaxometry

Нутационный ЯКР

■ Впервые в радиоспектроскопии ЯКР реализован метод PEANUT. Метод позволяет получать высокие нутационные частоты, компенсировать влияние неоднородности р.ч. поля, управлять селективностью возбуждения, не давая релаксационного уширения спектров.

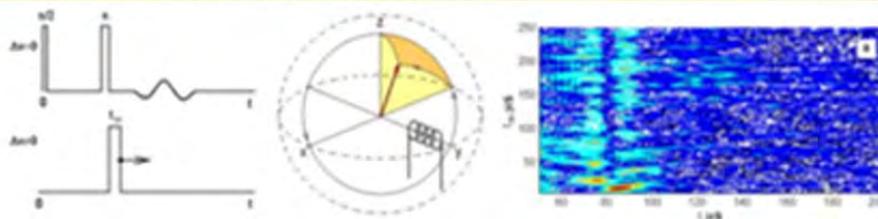


Разработан способ быстрой регистрации многомерных спектров в радиоспектроскопии при сохранении высокого разрешения линий и низкого уровня артефактов, основанный на неравномерной и адаптивной дискретизации



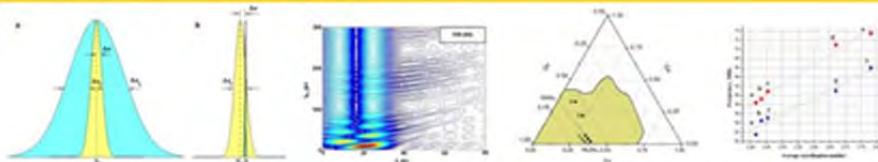
N. Sinyavsky, P. Dolinenkov and M. Mackowiak, PEANUT experiment in NQR spectroscopy for $I=3/2$, Solid State Nuclear Magnetic Resonance, v.43-44, 2012, 32-35

■ Изучена нециклическая геометрическая фаза в импульсных экспериментах ЯКР и ее проявления в нутационных экспериментах, что позволило использовать ее для определения спектральных параметров ЯКР в неупорядоченных структурах ХСП



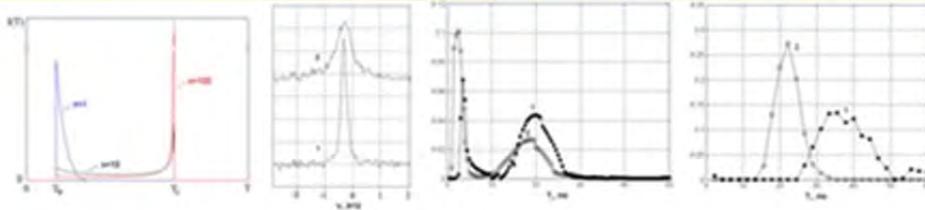
N. Sinyavsky, N. Kostrikova, The Geometrical Phase in the PEANUT Experiments for the NQR Spectroscopy for the Spins $I=3/2$, Appl Magn Reson, 47 (1), (2015) 63-76, DOI 10.1007/s00723-015-0731-y

■ Развита теория отклика спиновой системы на импульсное возбуждение для случая очень широких линий ЯКР, характерных для неупорядоченных структур



Glотова O.N., Sinyavsky N.Ya., Korneva I.P., Dobosz B., Krzyminiowski R., Ostafin M. and Nogaj B., Study of the EFG tensor at 75As nuclei in Ge-As-Se chalcogenide glasses, Magnetic Resonance in Chemistry, Volume 51, Issue 10, pages 614-620, October 2013

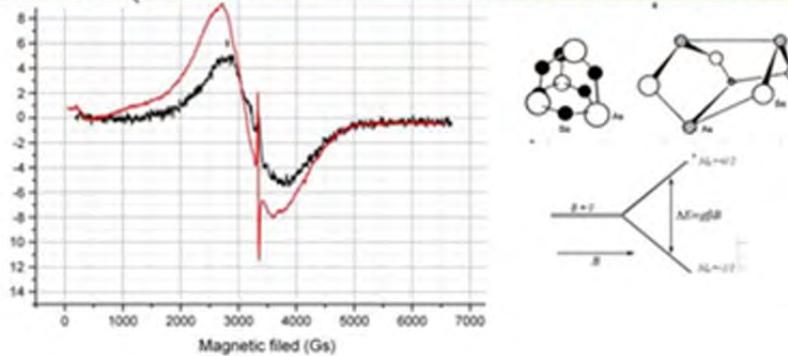
Экспериментально исследованы размерные эффекты в ЯКР. Определены времена релаксации для атомов на поверхности и в объеме кристаллита, а также коэффициенты спиновой диффузии.



N. Sinyavsky, P. Dolinenkov, G. Kupriyanova, The T1 and T2 Relaxation Times Distribution for the ^{35}Cl and ^{14}N NQR in Micro-composites and in Porous Materials, Applied Magnetic Resonance, (2014) 45:471–482

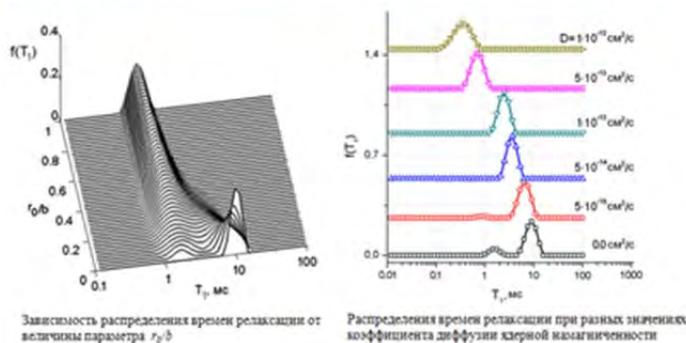
ЯКР и ЭПР

Впервые получены спектры ЭПР собственных парамагнитных центров стекол $\text{As}_{14}\text{Sb}_4\text{Se}_{77}$, $\text{As}_3\text{Se}_3\text{Sb}_2\text{Se}_3$ и $(\text{As}_3\text{Se}_3)_{0.75}(\text{Sb}_2\text{Se}_3)_{0.25}$ при температуре 300K и 77K, определены ширины линий, значения g-фактора и концентрации темновых центров. Исследованы фотоиндуцированные парамагнитные центры и эффект «старения».



O. N. Bolebrukh, N. Ya. Sinyavsky, I. P. Korneva, B. Dobosz, M. Ostafin, B. Nogaj, R. Krzyminiowski, Experimental study of the structure of chalcogenide glassy semiconductors in threecomponent systems of Ge-As-Se and As-Sb-Se by means of NQR and EPR spectroscopy, Central European Journal of Physics, Volume 11, Issue 12, P.1686-1693 (2013)

Решена задача о переносе ядерной намагниченности, вызванном наличием ее градиента из-за различной релаксационности в микрогранулах



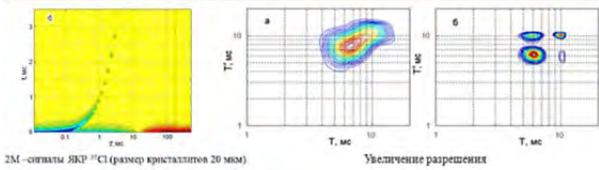
Зависимость распределения времен релаксации от величины параметра r_0/b

Распределения времен релаксации при разных значениях коэффициента диффузии ядерной намагниченности

N. Sinyavsky, I. Mershev, G. Kupriyanova, Application of Nuclear Quadrupole Resonance Relaxometry to Study the Influence of the Environment on the Surface of the Crystallites of Powder, Zeitschrift für Naturforschung A, 2015, 70(6)a: 451–457

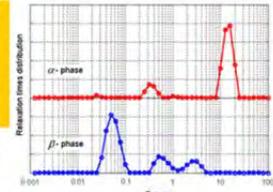
Двумерная релаксометрия ядерного квадрупольного резонанса и исследование диффузии ядерной намагниченности в микрокристаллах

■ Апробирована методика 2М – релаксометрии ЯКР с селективным возбуждением линий спектра, предложен способ повышения разрешения линий в распределениях времен релаксации



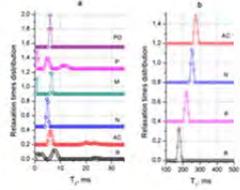
2М – сигналы ЯКР ¹³C (размер кристаллитов 20 нм)

■ Получены распределения времен релаксации во вращающейся системе координат, в том числе с использованием метода PEANUT для широких линий ЯКР; такой подход в радиоспектроскопии ранее не использовался

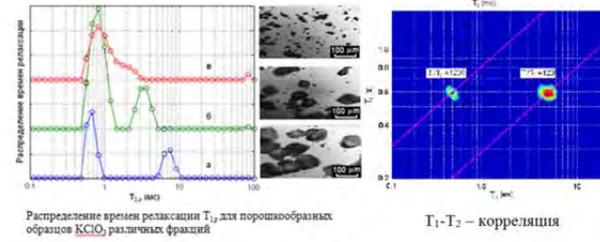


Распределение времен релаксации T_1 для α - и β - фаз образца параклоробензола

■ Исследовано влияние размеров гранул на характер распределения времен релаксации T_1 и T_2 , впервые в ЯКР реализована инверсия временных сигналов для получения распределения времен релаксации



Распределение времен T_1 (a) и T_2 (b) в разных пористых веществах

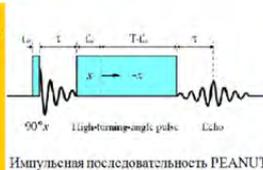


Распределение времен релаксации T_{12} для порошкообразных образцов $KClO_4$ различных фракций

T_1 - T_2 – корреляция

N. Sinyavsky, I. Mershev, G. Kupriyanova, Application of Nuclear Quadrupole Resonance Relaxometry to Study the Influence of the Environment on the Surface of the Crystallites of Powder, Zeitschrift für Naturforschung A, 2015, 70(6): 451–457

■ Экспериментально исследованы распределения времен релаксации в зависимости от состояния поверхности микрокристаллов в порошках, пористых и микрокомпозиционных средах, особенности фазовых переходов молекулярных кристаллов в микропористых структурах



ПУБЛИКАЦИИ

1. G Kupriyanova, A Zyubin, A Astashonok, A Orlova and E Prokhorenko "The magnetic-resonance properties study of nanostructures for spintronics by FMR", Journal of Physics: 324 (2011) 012012
2. A Zyubin, A Orlova, A Astashonok, G Kupriyanova and V Nevolin Fe/Ni thin films temperature investigation with MgO and SiO₂ interfaces by ferromagnetic resonance. Journal of Physics: 324 (2011) 012013
3. С.В. Молчанов, Г.В.Мозжухин, И.Г. Мершиев, Г.С.Куприянова,. Повышение эффективности вейвлет-обработки сигналов ЯКР модифицированными базисными функциями Морле. Вестник Российского государственного университета им. И.Канта. Серия физико-математических наук. Выпуск 5, с.69-76 (2011)
4. A. V. Anisimov, A. Yu. Goikhman, G. S. Kupriyanova, V. N. Nevolin, A. P. Popov and V. V. Rodionova. Change in the magnetic properties of polycrystalline thin-film magnetite upon introduction of an iron sublayer . Physics of the Solid State. V. 54, N 6 (2012), 1153-1159, DOI: 10.1134/S1063783412060030
5. Куприянова Г.С., Мозжухин Г.В., Молчанов В.В., Северин Е.А., Шмелев А.А. Метод многоимпульсной регистрации сигналов в неоднородном магнитном поле. Вестник БФУ им.И.Канта 2012, 4, стр 118-125
6. G.S.Kupriyanova, V.V.Molchanov, E.A.Severin, I.G.Mershiev. Composes pulses on inhomogeneous field NMR. In Magnetic Resonance Detection of Explosives and illicit Materials. Springer 2014, p.137-147
7. I.A. Shikhman, M.G. Shelyapina, G.S. Kupriyanova. A Density Functional Theory Study of the Fe/Fe₃O₄ (001) Interface. Solid State Phenomena 194 (2013) 288-291.
8. Веремейчик Я.В., Шурпик Д.В., Куприянова Г.С., Племенков В.В. Структурная идентификация сульфаниамидов методами ИК и ЯМР спектроскопии. Вестник БФУ им.И.Канта 4, 2013 с.52.
9. А.Ю.Зюбин, А.В. Асташенок, Г.С.Куприянова. Применение радиофизических методов для диагностики функциональных свойств магнитных туннельных переходов. Вестник Российского государственного университета им. И.Канта. Серия физико-математических наук. Выпуск 4, с.43-51 (2013)
10. G.V.Mozzhukhin, V.Z.Rameev, G.S. Kupriyanova, P.Aksu, B.Aktas. Cross- relaxation enhances NQR Ammonium Nitrite in low magnetic field. In Magnetic Resonance Detection of Explosives and illicit Materials. Springer 2014, p 45-59
11. N.Sinyavsky, P.Dolinenkov, G.Kupriyanova. T1 and T2 relaxation times distribution for 35 Cl and 14N NQR in micro-composites and in porous materials. Appl. Magn. Reson. 2014, V.45 N5 p.471-482
12. N.Ya. Sinyavsky, I.G. Mershiev and G.S. Kupriyanova. Влияние диффузии ядерной намагниченности на распределение времен релаксации в микрокристаллах. Изв. вузов. Физика, № 8, т. 57, с. 129-130, 2014.
13. G.V.Mozzhukhin, J.Barras, G.S. Kupriyanova, V.Z.Rameev Two-Frequency Nuclear Resonance for Line Identification. Applied Magnetic Resonance. V.45, N12 2015, p. 261-165
14. N.Ya. Sinyavsky, I.G. Mershiev and G.S. Kupriyanova. Application of nuclear quadrupole resonance relaxometry to study the influence of the environment on the surface of the crystallites of powder. Z. für Naturforschung 70(6) A, (2015) 451-457
15. N. Sinyavsky, P. Dolinenkov, I. Korneva, The distribution change of relaxation times in 35Cl NQR for phase transitions in p-Dichlorobenzene, Appl. Magn. Reson., 2015, Volume 46, Issue 1, pp 17-24
16. Синявский Н.Я., И.Г. Мершиев, Г.С. Куприянова, Особенности применения метода инверсия-восстановление для широких линий ЯКР, Изв. вузов. Физика, 2015 № 12)
17. N. Sinyavsky, N. Kostrikova, The Geometrical Phase in the PEANUT Experiments for the NQR Spectroscopy for the Spins I=3/2, Appl Magn Reson, 47 (1), (2015) 63-76, DOI 10.1007/s00723-015-0731-y
18. Nikolay Sinyavsky, Georgy V. Mozhukhin, and Philip Dolinenkov, Size Effect in 14N Nuclear Quadrupole Resonance Spectroscopy, T. Apih et al. (eds.), Magnetic Resonance Detection of Explosives and Illicit Materials, NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics, Springer Science+Business Media Dordrecht 2014, 69-76
19. O. N. Bolebrukh, N. Ya. Sinyavsky, I. P. Korneva , B. Dobosz, M. Ostafin, B. Nogaj, R. Krzyminiewski, Experimental study of the structure of chalcogenide glassy semiconductors in threecomponent systems of Ge-As-Se and As-Sb-Se by means of NQR and EPR spectroscopy, Central European Journal of Physics, Volume 11, Issue 12, P.1686-1693 (2013)
20. N.Ya. Sinyavsky, I.G. Mershiev, I.P. Korneva, Investigation of Corrosion Inhibitors by Nuclear Quadrupole Resonance Relaxometry Method, TransNav Journal Vol. 9 No. 4, 597-590.
21. Долиненков Ф.Н., Синявский Н.Я. Влияние размеров кристаллитов порошка на времена релаксации ЯКР, Вестник Балтийского федерального университета им. И. Канта, Калининград, 2012, вып. 10, стр. 119-126
22. Синявский Н.Я., Куприянова Г.С., Долиненков Ф.Н. Распределение времен релаксации ЯКР во вращающейся системе координат в микроразмерных кристаллах, Вестник БФУ им. И. Канта (физ.-мат. науки), 2015, №4, 18-24.

ПАТЕНТЫ

1. Мозжухин Г.С., Мершиев И.Г., Молчанов С.В., Куприянова Г.С. Способ детектирования ЯМР-ЯКР сигналов. G01N24/08 (2006.01) № 2490618, зарегистрирован 20 августа 2013
2. Мершиев И.Г., Куприянова Г.С. Портативный ЯМР релаксометр. Патент на полезную модель. 2015100995/28, 12.01.2015
3. Синявский Н.Я., Долиненков Ф.Н., Способ измерения размеров микрокристаллов. Патент RU 2539775 C1, опубл.:27.01.2015, бюл. №3.



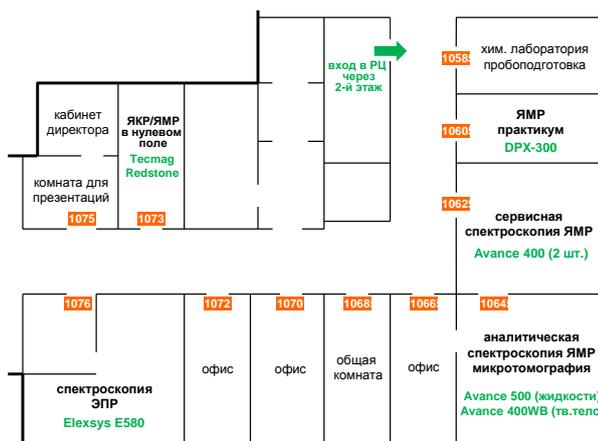
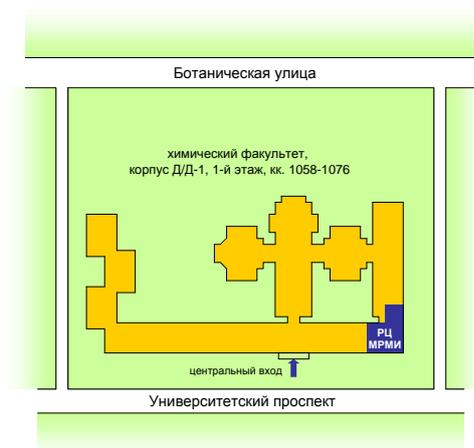
ЧЕМ МЫ ЗАНИМАЕМСЯ?

РЦ «Магнитно-резонансные методы исследования» Научного парка СПбГУ предоставляет доступ к оборудованию, инфраструктуре и практическому опыту своих сотрудников для выполнения и сопровождения исследований в фундаментальных, прикладных и инновационных проектах, использующих возможности спектроскопии ядерного магнитного, электронного парамагнитного и ядерного квадрупольного резонанса, а также микротомографии. Для внешних организаций (медицинских, фармакологических, предприятий) проведение исследований возможно на договорной основе. Сотрудничество с университетами и научно-исследовательскими институтами, нацеленное на публикацию результатов в реферируемой научной периодике с указанием аффилиации СПбГУ, возможно на безвозмездной основе.

КАК НАС НАЙТИ?

Ресурсный центр «Магнитно-резонансные методы исследования»
Санкт-Петербургский государственный университет
Университетский пр., д. 26
198504 Санкт-Петербург, Россия

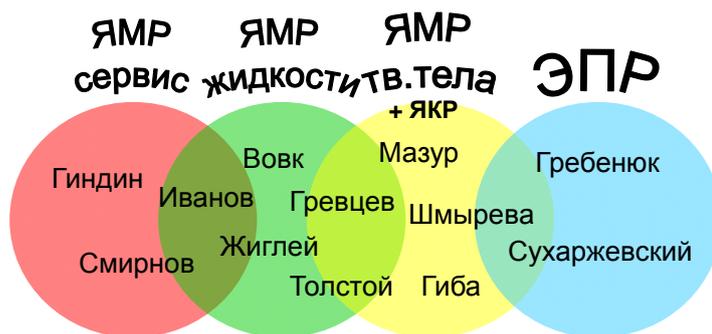
cmr.spbu.ru



Телефон +7 812

Комната	Телефон	Местный телефон
1058 Химическая лаборатория		
1060 ЯМР сервис	... 428-43-25	4325
1062 ЯМР сервис	... 428-95-63	9563
1064 Аналитическая спектроскопия ЯМР		
1066 Офис	... 363-69-25	5915 (IP-телефония)
1068 Общая комната		5662 (IP-телефония)
1070 Офис		5916 (IP-телефония)
1072 Офис		5917 (IP-телефония)
1073 ЯМР и ЯКР в нулевом поле	... 428-95-64	9564
1075 Директор	... 363-68-99	5661 (IP-телефония)
1076 Спектроскопия ЭПР	... 428-95-65	9565

СОТРУДНИКИ



к.ф.-м.-н., доц. Пётр Михайлович Толстой, директор
ЯМР жидкостей, растворов и твердых тел

peter.tolstoy@spbu.ru

Тел. (моб.): +7 (921) 430-81-91

Тел. (раб. ком. 1075): +7 (812) 363-68-99

Область научных интересов: водородная связь, межмолекулярные взаимодействия, криоспектроскопия, комбинированная ЯМР/УФ спектроскопия.



к.х.н., Владимир Александрович Гиндин, заместитель директора
ЯМР жидкостей и растворов, ЯМР-сервис

vladimir.gindin@spbu.ru

Тел. (раб. ком. 1062): +7 (812) 428-95-63

Тел. (раб. ком. 1070): +7 (812) 324-12-70, доп. 5916

Область научных интересов: применение спектроскопии ЯМР для исследования структуры и таутомерии органических соединений и комплексов.



Сергей Николаевич Смирнов, ведущий специалист
ЯМР спектроскопия жидкостей и растворов, ЯМР-сервис

sergey.smirnov@spbu.ru

Тел. (раб. ком. 1062): +7 (812) 428-95-63

Тел. (раб. ком. 1070): +7 (812) 324-12-70, доп. 5916

Область научных интересов: ЯМР высокого разрешения, водородные связи, ЯМР в растворах фреонов.



Иванов Александр Юльевич, ведущий специалист
ЯМР жидкостей и растворов, ЯМР-сервис

alexander.ivanov@spbu.ru

Тел. (раб. ком. 1062): +7 (812) 428-95-63

Тел. (раб. ком. 1070): +7 (812) 324-12-70, доп. 5916

Область научных интересов: установление структуры органических соединений методами ЯМР.



Вовк Михаил Андреевич, специалист
ЯМР жидкостей и растворов, ЯМР-релаксация, диффузия

m.vovk@spbu.ru

Тел. (раб. ком. 1066): +7 (812) 363-69-25

Область научных интересов: ЯМР спектроскопия высокого разрешения, ЯМР-релаксация, гидратация органических молекул в водно-солевых растворах.



Гревцев Артем Сергеевич, специалист
ЯМР спектроскопия жидкостей и растворов

a.grevtsev@spbu.ru

Тел. (раб. ком. 1066): +7 (812) 363-69-25

Область научных интересов: композитные материалы для солнечных элементов (СЭ), тонкопленочные СЭ на основе наночастиц халькопиритов.



Жиглей Эльвира Сергеевна, специалист
ЯМР спектроскопия жидкостей и растворов

e.zhigley@spbu.ru

Тел. (раб. ком. 1066): +7 (812) 363-69-25

Область научных интересов: лазерно-индуцированное осаждение металлов из раствора, физико-химические методы анализа, ямр спектроскопия жидкостей.



к.ф.-м.н. Мазур Антон Станиславович, специалист
ЯМР спектроскопия твердых тел, МРТ

a.mazur@spbu.ru

Тел. (раб. ком. 1066): +7 (812) 363-69-25

Область научных интересов: ЯМР в магнито-упорядоченных веществах, наноструктурированные материалы, ЯМР-релаксация в твердых телах



Гиба Иван Сергеевич, специалист
ЯМР спектроскопия твердых тел

i.giba@spbu.ru

Тел. (раб. ком. 1066): +7 (812) 363-69-25

Область научных интересов: ЯМР в твердых телах, металлокомплексный катализ в химии органических полимеров.



к.ф.-м.н. Шмырева Анна Анатольевна, специалист
ЯМР магнитоупорядоченных материалов, ЯКР

anna.shmyreva@spbu.ru

Тел. (раб. ком. 1073): +7 (812) 428-95-64

Тел. (раб. ком. 1072): +7 (812) 324-12-70, доп. 5917

Область научных интересов: ЯМР в магнитоупорядоченных веществах, метод спинового эха, наноструктурированные материалы.



к.ф.-м.н. Сухаржевский Станислав Михайлович, спец.
ЭПР спектроскопия

stanislav.sukharzhevskii@spbu.ru

Тел. (раб. ком. 1076): +7 (812) 428-95-65

Область научных интересов: теория ЭПР, использование спектроскопических методов в геологии и экологии



Гребенюк Екатерина Ивановна, специалист
ЭПР спектроскопия

e.grebenyuk@spbu.ru

Тел. (раб. ком. 1076): +7 (812) 428-95-65

Область научных интересов: спектроскопические методы в химии, золь-гель, нанокомпозиты.

ОБОРУДОВАНИЕ

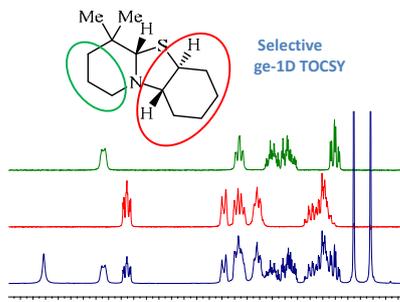
СПЕКТРОМЕТРЫ ЯМР 2x BRUKER 400 МГц AVANCE и BRUKER 300 МГц DPX



Приборы для поточных сервисных измерений 1D и 2D спектров ЯМР жидкостей и растворов.

- Датчики прямого и инверсного наблюдения.
- Диапазон наблюдаемых ядер от ^1H до ^{109}Ag .
- Регистрация спектров $^1\text{H}\{^{19}\text{F}\}$ и $^{19}\text{F}\{^1\text{H}\}$.
- Наблюдение ^2H со стабилизацией на ^{19}F .

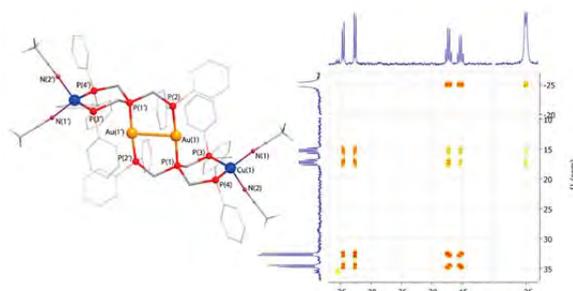
ШИРОКИЙ ДИАПАЗОН ЯМР МЕТОДОВ



Селективные ЯМР эксперименты используются для получения спектров от отдельных спиновых подсистем в целях установления стереохимического строения сложных молекул.

V.V. Sokolov, A.Yu. Ivanov, M.S. Avdontseva, A.A. Zolotarev, Chem. Heterocycl. Compd. 2014, 50, 550-556.

СТРУКТУРНЫЕ МЕТОДЫ 2D,3D ЯМР



Гомоядерные корреляции, такие как ^{31}P - ^{31}P COSY и другие многомерные методы позволяют регистрировать дальние спин-спиновые взаимодействия и определять структуру металлоорганических комплексов.

M.T. Dau, J.R. Shakirova, A.J. Karttunen, E.V. Grachova, S.P. Tunik et al., Inorg. Chem., 2014, 53, 4705-4715.

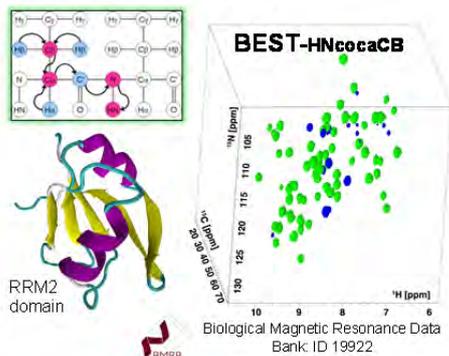
СПЕКТРОМЕТР ЯМР BRUKER 500 МГц AVANCE



ЯМР спектрометр для измерений 1D, 2D и 3D спектров жидкостей и растворов.

- Длительные измерения при низкой температуре (до 110 K).
- Измерения по трем каналам (от ^1H до ^{109}Ag).
- Исследование диффузии при температурах до 470 K.
- Одновременная регистрация спектров ЯМР и УФ.

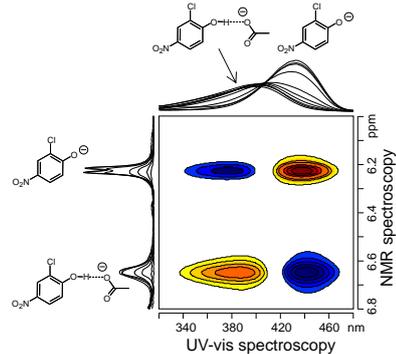
ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ БЕЛКОВ



Структура домена RRM2 белка TDP-43 определена с помощью многомерной спектроскопии ЯМР. TDP-43 представляет собой основной компонент нерастворимых отложений в мозговых нервных клетках пациентов с лобно-височной деменцией.

N.R. Skrynnikov, S.O. Rabdano, I.S. Podkorytov et al., 2014, *unpublished*.

КОМБИНИРОВАННЫЕ ЯМР/УФ СПЕКТРЫ

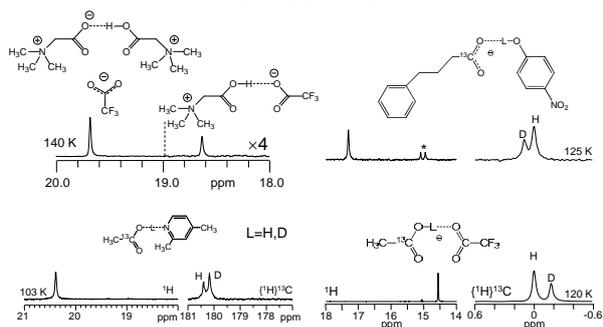


УФ спектрометр, встроенный в магнит ЯМР спектрометра, позволяет регистрировать одновременно ЯМР и УФ спектры и анализировать согласованный набор спектральных данных при помощи 2D кросс-корреляций.

B. Koeppel, P.M. Tolstoy, E.T. J. Nibbering, T. Elsaesser, J. Phys. Chem. Lett., 2011, 2, 1106-1110.

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ СПЕКТРЫ ЯМР

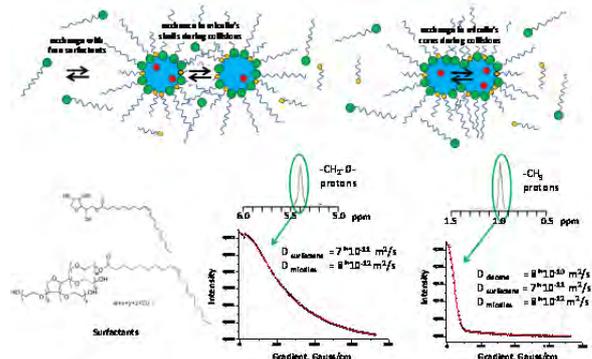
РАСТВОРОВ



Сверх-низкотемпературная спектроскопия ЯМР растворов в сжиженных газах ($\text{CDF}_3/\text{CDF}_2\text{Cl}$, до 100 K) позволяет достичь режима медленного молекулярного и протонного обменов и регистрировать сигналы межмолекулярных комплексов различной стехиометрии и изотопного состава.

B. Koeppel, J. Guo, P.M. Tolstoy, G.S. Denisov, H.-H. Limbach, J. Am. Chem. Soc. 2013, 135, 7553-7566.

СПЕКТРОСКОПИЯ ЯМР DOSY



Диффузионно-упорядоченная спектроскопия ЯМР (DOSY) может быть использована для разделения спектров смесей на спектры отдельных компонент, а также для определения размеров супрамолекулярных структур, например в микроэмульсиях.

N.A. Smirnova, E.A. Safonova, A.S. Koneva, M. Vovk et al., 2015, *unpublished*.

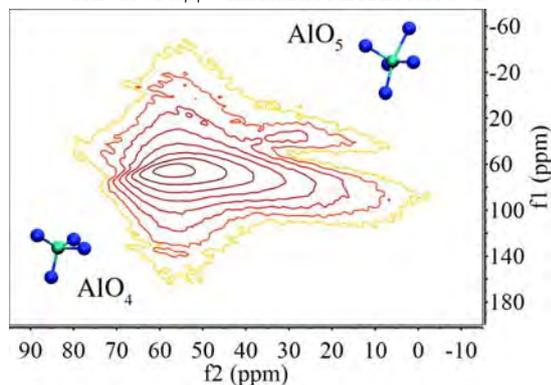
СПЕКТРОМЕТР ЯМР БРУКЕР 400 МГц WB AVANCE



Спектрометр для исследования образцов в твердой фазе: кристаллов, порошков, слабоупорядоченных сред и материалов, гелей, жидких кристаллов, аморфных сред, наноструктур (цеолитов, силикатов) и т.п., а также для исследования процессов диффузии и получения микротомографических изображений.

- Измерения при температурах от 130 К до 870 К.
- Микротомография.
- Скорость вращения образца до 30 кГц.
- Исследование диффузии (градиенты до 3000 Гаусс/см).

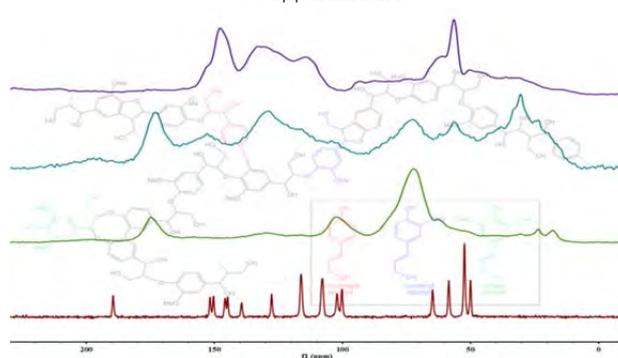
СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ



Исследование структурного состава много-компонентных стекол с помощью MQ MAS и других методов позволяет разрабатывать материалы с заданными физико-химическими свойствами.

A.A. Osipov, V.E. Eremyashev, A.S. Mazur, P.M. Tolstoy, L.M. Osipova, Phys. Chem. Glasses 2015, *accepted*.

ИССЛЕДОВАНИЯ СМЕСЕЙ СЛОЖНЫХ ПРИРОДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ



Анализ спектров ^{13}C ЯМР комплексных смесей макромолекул природного происхождения позволяет отслеживать процессы разложения (например, лигнина и его производных) и образования почв.

A.V. Vasiliev et al., A.I. Abakumov et al., 2015, *unpublished*.

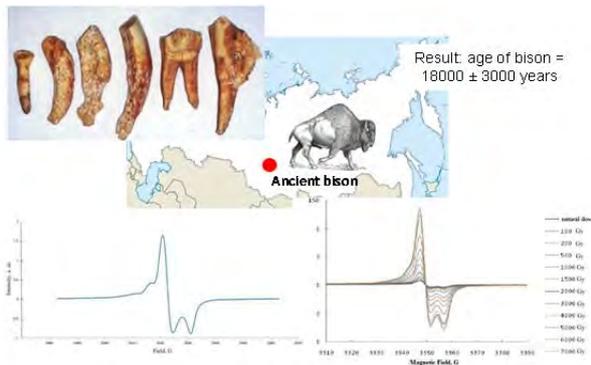
СПЕКТРОМЕТР ЭПР БРУКЕР ELEXSYS E580



Спектрометр ЭПР ($\lambda = 3.2$ см, X-диапазон) для изучения парамагнитных центров, локализованных в твердых телах, жидкостях, растворах, включая водные растворы и газах. Спектрометр предназначен для работы как в CW-, так и в FT-режиме.

- Облучения в УФ диапазоне (100 Вт, 200-2000 нм).
- Температурный диапазон от 3.7 К до 500 К.
- Работа в режиме ENDOR/TRIPLE.

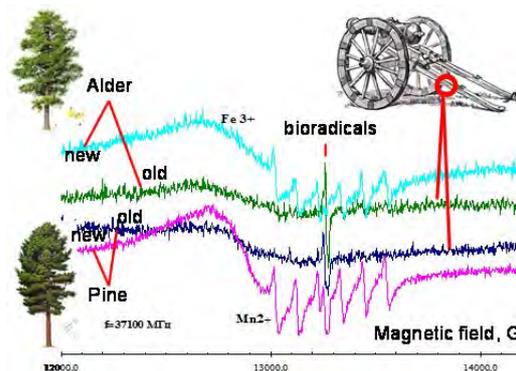
ЭПР ДАТИРОВАНИЕ ПО СПЕКТРАМ ЗУБНОЙ ЭМАЛИ



Спектры ЭПР радиационных дефектов в эмали зубов древнего бизона. Физическая природа центров (в основном анионы CO_2^-) и их поведение во времени лежат в основе принципов определения возраста по фрагментам останков палеонтологических животных.

A.I. Antipov, A.Yu. Kul'taeva, S.M. Sukharzhevski et al., 2014, *unpublished*

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССОВ РАЗЛОЖЕНИЯ ДРЕВЕСИНЫ



Спектры ЭПР современной и старой древесины с раскопов на Бородинском поле. Идентифицируются спектры ионов марганца и биорадикалов. Данные были использованы для реконструкции событий во время Бородинского сражения.

S.M. Sukharzhevski et al., *unpublished*

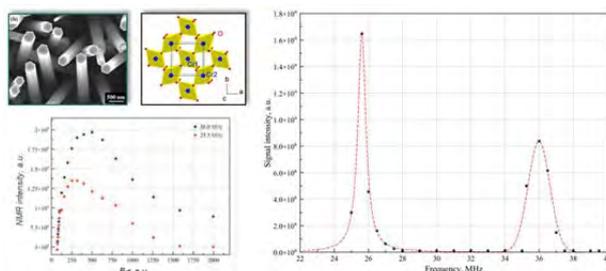
СПЕКТРОМЕТР ЯМР/ЯКР ТЕСМАГ REDSTONE NMR/NQR 1-500 МГц (ДАТЧИК 27-120 МГц)



Спектрометр позволяет получать спектры ЯМР и ЯКР для исследования твердых тел, металлов, стекол и магнитоупорядоченных образцов.

- Диапазон температур от 4 К до 500 К.
- ЯКР на ядрах ${}^7\text{Li}$, ${}^{27}\text{Al}$, ${}^{35}\text{Cl}$, ${}^{63,65}\text{Cu}$, ${}^{75}\text{As}$, ${}^{93}\text{Nb}$, ${}^{183}\text{Ta}$ и т.д.
- ЯМР на ядрах ${}^{11}\text{B}$, ${}^{57}\text{Fe}$, ${}^{59}\text{Co}$, ${}^{61}\text{Ni}$ и т.д.
- Изучение ориентационной зависимости для монокристаллов.

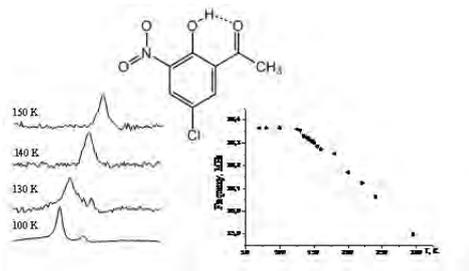
ЯМР МАГНитоупорядоченных НАНОЧАСТИЦ



Две линии в спектре ЯМР CrO_2 наностержней со структурой рутила, позволили выявить два неэквивалентных типа ионов Cr, вместо моновалентного Cr^{4+} .

A.A. Shmyreva, O.M. Osmolowskaya et al., 2015, *unpublished*.

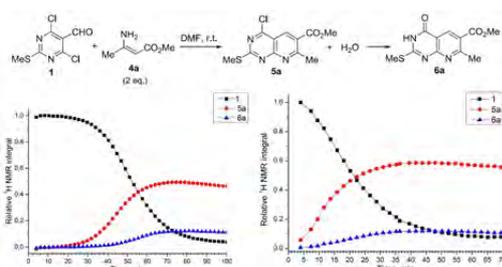
${}^{35}\text{Cl}$ СПЕКТРЫ ЯКР ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ



По спектрам ЯКР на ядрах ${}^{35}\text{Cl}$ удается проследить за тем как 2-гидрокси-3-нитро-5-хлорацетофенон испытывает фазовый переход при температуре, близкой к 120 К.

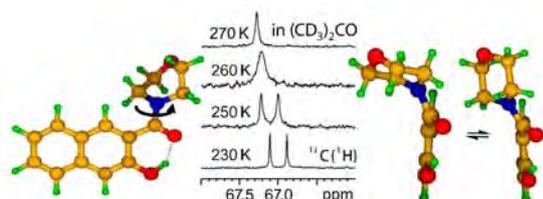
E.V. Kukushkina, A.I. Filarowski, P.M. Tolstoy et al., 2015, *unpublished*.

НЕКОТОРЫЕ ПУБЛИКАЦИИ 2015



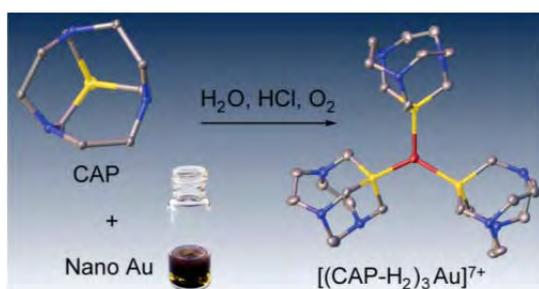
A new facile synthesis of pyrido[2,3-d]pyrimidin-4-ones has been developed. The reactions were monitored by ^1H NMR and the structure of the product was confirmed by ^1H , ^{13}C NMR, as well as HSQC and HMBC methods.

M.E. Chizhova, O.Yu. Bakulina, A.Yu. Ivanov, P.S. Lobanov, D.V. Dar'in, *Tetrahedron* 2015, 71, 6196-6203.
DOI:10.1016/j.tet.2015.06.085.



The conformational states of three b-hydroxynaphthylamides (morpholine, pyrrolidine and dimethylamine derivatives) have been analyzed by NMR. The energy barriers for the amide group rotation around the CN bond were estimated from the line shape analysis of ^1H and ^{13}C NMR signals.

T. Kozlecki, P.M. Tolstoy, A. Kwocz, M.A. Vovk, A. Kochel, I. Polowczyka, P.Yu. Tretyakov, A. Filarowski, *Spectrochim. Acta A*, 2015, 149, 254–262. DOI:10.1016/j.saa.2015.04.052.



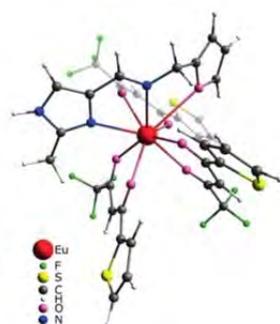
A tricyclic phosphine with previously unreported tris(homoadamantane) cage architecture is described. Unusual chemical properties of various aminophosphines such as Verkade's ligand and tris(aziridinyl)phosphine has been linked to their low steric demand (measured as cone angle), which leads to significant downfield shift of ^{31}P NMR signals.

S.N. Britvin, A. Lotnyk, *J. Am. Chem. Soc.*, 2015, 137 (16), pp 5526–5535. DOI:10.1021/jacs.5b01851.



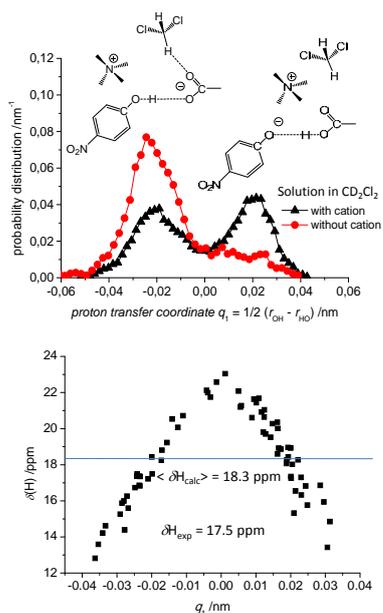
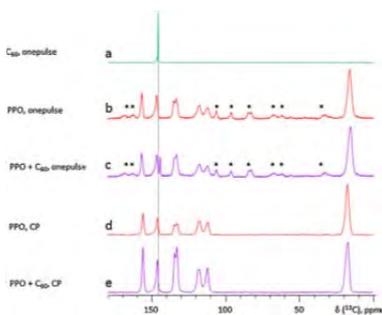
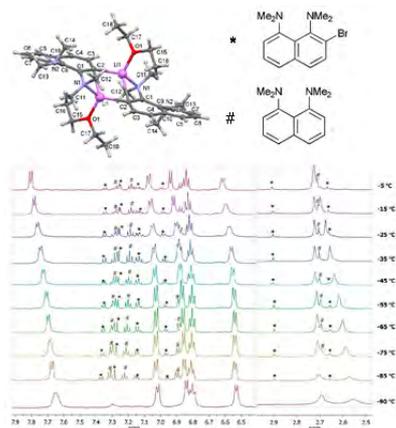
The intermolecular complex with a CHN hydrogen bond formed by 1,1-dinitroethane and 2,4,6-trimethylpyridine dissolved in CD_2Cl_2 was studied experimentally by ^1H NMR spectroscopy at 180–300 K. Equilibrium between the molecular $\text{CH}\cdots\text{N}$ form and the zwitterionic C^-/HN^+ form was detected, analyzed and discussed in the slow exchange regime in the NMR time scale.

E. Yu. Tupikina, G.S. Denisov, P.M. Tolstoy, *J. Phys. Chem. A*, 2015, 119, 659-668. DOI: 10.1021/jp511493m.



The Schiff base NNO ligand 1-(furan-2-yl)-N-[(2-methyl-1Himidazol-4-yl)methylene]methanamine was synthesized and characterized by XRD crystallography, mass spectrometry, and NMR spectroscopy. Two lanthanide complexes $[\text{Ln}(\text{tta})_3(\text{NNO})]$ ($\text{Ln} = \text{EuIII}$ and LuIII ; tta = thenoyltrifluoroacetone) were prepared and studied spectroscopically.

K.S. Kisel, G. Linti, G.L. Starova, V.V. Sizov, A.S. Melnikov, A.P. Pushkarev, M.N. Bochkarev, E.V. Grachova, S.P. Tunik, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2015, Issue 10, 1734–1743. DOI: 10.1002/ejic.201403186.



It has been found that 1,8-bis-(dimethylamino)-naphthalene (DMAN), unlike N,N-dimethylaniline, undergoes ring metallation in n-BuLi-TMEDA-Et₂O system with low selectivity and in poor total yield. The situation is significantly improved in t-BuLi-TMEDA-n-hexane system when 3- and 4-lithium derivatives become the only reaction products in good yield. The formation of 3-Li-DMAN is especially fortunate since no method of direct meta-functionalization of DMAN has been known to date.

A. S. Antonov, A. F. Pozharskii, V. A. Ozeryanskii, A. Filarowski, K. Yu. Suponitsky, P. M. Tolstoy, M. A. Vovk, Dalton Trans. 2015, Advanced Article. DOI:10.1039/C5DT02482J.

The physicochemical features of nanocomposites of poly(2,6-dimethyl-1,4-phenylene oxide) (PPO) and fullerene C₆₀ were studied with the purpose of using these compounds as a selective layer of composite membranes. The nature of the interaction between PPO and C₆₀ molecules in composite was studied by NMR.

A. Penkova, G. Polotskaya, A. Toikka, Chem. Eng. Process., 2015, 87, 81-87, DOI: 10.1016/j.cep.2014.11.015.

A joint experimental and QC study on the influence of solvent dynamics on the protonation equilibrium in a strongly H-bonded phenol-acetate complex in CD₂Cl₂ is presented. Experimentally, combined low-temperature ¹H and ¹³C NMR and UV-vis spectroscopy was used, showing proton tautomerism between PhOH...⁻OAc and PhO⁻...HOAc forms. Computationally, *ab initio* molecular dynamics was used. The relative motion of counter-cation and “free” carbonyl group of the acid, as well as breaking and formation of weak H-bonds with the CH groups of the solvent was shown to determine the geometry of the strong OHO hydrogen bond.

S. Pylaeva, C. Allolio, B. Koeppel, G.S. Denisov, H.-H. Limbach, D. Sebastiani, P.M. Tolstoy, PCCP 2015, 17, 4634-4644. DOI: 10.1039/c4cp04727c.

ПУБЛИКАЦИИ 2014

1. I.S. Krytchankou, D.V. Krupenya, A.J. Karttunen, S.P. Tunik, T.A. Pakkanen, P.-T. Choud, I.O. Koshevoy, “Triphosphine-supported bimetallic AuI-MI (M = Ag, Cu) alkynyl clusters”, Dalton Trans., 2014, 43, 3383-3394. DOI: 10.1039/C3DT52658E
2. J.R. Shakirova, E.V. Grachova, A.J. Karttunen, V.V. Gurzhiy, S.P. Tunik, I.O. Koshevoy, “Metallophilicity-assisted assembly of phosphinebased cage molecules”, Dalton Trans., 2014, 43, 6236-6243. DOI: 10.1039/c3dt53645a
3. A.S. Pankova, M.A. Kuznetsov, “Synthesis and thermal transformations of spiro-fused N-phthalimidoaziridines”, Tetrahedron Lett., 2014, 55, 2499-2503. DOI: http://dx.doi.org/10.1016/j.tetlet.2014.03.014
4. A.P. Molchanov, R.S. Savinkov, A.V. Stepanov, G.L. Starova, R.R. Kostikov, V.S. Barnakova, A.V. Ivanov, “A Highly Efficient and Stereoselective Cycloaddition of Nitrones to N-Vinylpyrroles”, Synthesis 2014, 46, 771-780. DOI: 10.1055/s-0033-1340479

5. A.V. Stepanov, A.G. Larina, V.M. Boitsov, V.V. Gurzhiy, A.P. Molchanov, R.R. Kostikov, "Synthesis of indene derivatives via reactions of vinylidenecyclopropanes with the N-acyliminium cations generated from hydroxylactams", *Tetrahedron Lett.*, 2014, 55, 2022-2026. DOI: 10.1016/j.tetlet.2014.02.039
6. M.T. Dau, J.R. Shakirova, A.J. Karttunen, E.V. Grachova, S.P. Tunik, A.S. Melnikov, T.A. Pakkanen, I.O. Koshevoy, "Coinage Metal Complexes Supported by the Tri- and Tetrakisphosphine Ligands", *Inorg. Chem.*, 2014, 53, 4705-4715. DOI: 10.1021/ic500402m
7. A.A. Melekhova, D.V. Krupenya, V.V. Gurzhiy, A.S. Melnikov, P.Yu. Serdobintsev, S.I. Selivanov, S.P. Tunik, "Synthesis, characterization, luminescence and non-linear optical properties of diimine platinum(II) complexes with arylacetylene ligands", *J. Organomet. Chem.*, 2014, 763-764, 1-5. DOI: 10.1016/j.jorganchem.2014.04.002
8. I.O. Koshevoy, Y.-C. Chang, Y.-A. Chen, A.J. Karttunen, E.V. Grachova, S.P. Tunik, J. Janis, T.A. Pakkanen, P.-T. Chou, "Luminescent Gold(I) Alkynyl Clusters Stabilized by Flexible Diphosphine Ligands", *Organometallics*, 2014, 33, 2363-2371. DOI: 10.1021/om5002952
9. E.Yu. Bulatov, T.G. Chulkova, I.A. Boyarskaya, V.V. Kondratiev, M. Haukka, V.Yu. Kukushkin, "Triple associates based on (oxime)Pt(II) species, 18-crown-6, and water: Synthesis, structural characterization, and DFT study", *J. Molec. Struct.* 2014, 1068, 176-181. DOI: 10.1016/j.molstruc.2014.04.010
10. L.L. Rodina, J.J. Medvedev, O.S. Galkina, V.A. Nikolaev, "Thermolysis of 4-Diazotetrahydrofuran-3-ones: Total Change of Reaction Course Compared to Photolysis", *Eur. J. Org. Chem.* 2014, 14, 2993-3000. DOI: 10.1002/ejoc.201400161
11. M.A. Kinzhilov, K.V. Luzyanin, I.A. Boyarskaya, G.L. Starova, V.P. Boyarskiy, "Synthetic and structural investigation of [PdBr₂(CNR)₂] (R = Cy, Xyl)", *J Molec. Struct.* 2014, 1068, 222-227. DOI: 10.1016/j.molstruc.2014.04.025
12. M.V. Popova, D. Michel, "Behavior of Sodium Lauroyl Sarcosinate in Solution and Binary Mixtures by Means NMR", *Appl. Magn. Reson.* 2014, 45, 353-364. DOI: 10.1007/s00723-014-0531-9
13. P.R. Golubev, A.S. Pankova, M.A. Kuznetsov, "Transition-Metal-Free Approach to 4-Ethynylpyrimidines via Alkenynes", *Eur. J. Org. Chem.* 2014, 3614-3621. DOI: 10.1002/ejoc.201402045
14. J. Malinina, T.Q. Tran, A.V. Stepanov, V.V. Gurzhiy, G.L. Starova, R.R. Kostikov, A.P. Molchanov, "[3+2] Cycloaddition reactions of arylallenes with C-(N-arylcarbonyl)- and C,C-bis(methoxycarbonyl)nitrones and subsequent rearrangements", *Tetrahedron Lett.* 2014, 55, 3663-3666. DOI: 10.1016/j.tetlet.2014.04.107
15. M.A. Kuznetsov, A.Ya. Bepalov, "One-pot, Three-component Synthesis of [1,3]thiazolo[4,3-b][1,3,4]thiadiazoles: Correct Structure of the Products", *Chem. Heterocycl. Compd.* 2014, 49, 1458-1463. DOI: 10.1007/s10593-014-1396-4
16. V.A. Rassadin, E. Nicolas, Y. Six, "Ti(OiPr)₄/nBuLi: an attractive reagent system for [2+2+2] cyclootrimerisation reactions", *Chem. Commun.* 2014, 50, 7666-7779. DOI: 10.1039/C4CC02698E
17. V.V. Sokolov, A.Yu. Ivanov, M.S. Avdontseva, A.A. Zolotarev, "Stereochemistry and NMR Spectra of Some Tricyclic Condensed Thiazolidine Derivatives with a Bridgehead Nitrogen Atom". *Chem. Heterocycl. Compd.* 2014, 50, 550-556. DOI: 10.1007/s10593-014-1506-3
18. P.B. Davidovich, D.S. Novikova, V.G. Tribulovich, S.N. Smirnov, V.V. Gurzhiy, G. Melino, A.V. Garabadzhiu, "First X-ray Structural Characterization of Isatin Schiff-Base Derivative. NMR and Theoretical Conformational Studies", *J. Molec. Struct.* 2014, 1075, 450-455. DOI: 10.1016/j.molstruc.2014.07.008
19. A. Miroslavov, Y. Polotskii, V. Gurzhiy, A. Ivanov, A. Lumpov, M. Tyupina, G. Sidorenko, P. Tolstoy, D. Maltsev, D. Suglobov, "Technetium and Rhenium Pentacarbonyl Complexes with C₂ and C₁₁ ω-Isocyanocarboxylic Acid Esters", *Inorg. Chem.* 2014, 53(15), 7861-7869. DOI: 10.1021/ic500327s
20. Dz.N. Konshina, A.V. Furina, Z.A. Temerdashev, A.A. Gurinov, V.V. Konshin, "Immobilization of Guanazolyl Functional Groups on Silica for Solid-Phase Extraction of Metal Ions", *Analytical Lett.* 2014, 47, 2665-2681. DOI: 10.1080/00032719.2014.917421
21. A.V. Stepanov, V.M. Boitsov, A.G. Larina, A.P. Molchanov, "Acid-induced rearrangement of cycloadducts from N-aryl itaconimides and 1,3-diphenylisobenzofuran", *Tetrahedron Lett.* 2014, 55, 4895-4897. DOI: 10.1016/j.tetlet.2014.06.107
22. D.S. Ryabukhin, L.Yu. Gurskaya, G.K. Fukin, A.V. Vasilyev, "Superelectrophilic activation of N-aryl amides of 3-arylpropynoic acids: synthesis of quinolin-2(1H)-one derivatives", *Tetrahedron* 2014, 70, 6428-6443. DOI: 10.1016/j.tet.2014.07.028
23. O.Yu. Bakulina, A.Yu. Ivanov, D.V. Dar'in, P.S. Lobanov, "New transformations of 2-methylsulfanyl-4,6-dichloropyrimidine-5-carbaldehyde involving enamines: synthesis of condensed azines", *Mendeleev Commun.* 2014, 24, 163-164. DOI: 10.1016/j.mencom.2014.04.013
24. I.I. Eliseev, P.V. Gushchin, Yi.-A. Chen, P.-T. Chou, M. Haukka, G.L. Starova, V.Yu. Kukushkin, "Phosphorescent Pt(II) Systems Featuring Both 2,2'-Dipyridylamine and 1,3,5-Triazapentadiene Ligands", *Eur. J. Inorg. Chem.* 2014, 4101-4108. DOI: 10.1002/ejic.201402364
25. E.A. Valishina, M.F.C. Guedes da Silva, M.A. Kinzhilov, S.A. Timofeeva, T.M. Buslaeva, M. Haukka, A.J.L. Pombeiro, V.P. Boyarskiy, V.Yu. Kukushkin, K.V. Luzyanin, "Palladium-ADC complexes as efficient catalysts in copper-free and room temperature Sonogashira coupling", *J. Molec. Catalysis A* 2014, 395, 162-171, DOI: 10.1016/j.molcata.2014.08.018
26. O.Yu. Bakulina, A.Yu. Ivanov, P.S. Lobanov, D.V. Dar'in, "Synthesis of novel peri-fused heterocyclic systemsdpyrimido [4,5,6-de][1,8]naphthyridines, based on interaction of 4,6-dichloro-2-methylthiopyrimidine-5-carbaldehyde with geminal enediamines", *Tetrahedron* 2014, 70, 7900-7905. DOI: 10.1016/j.tet.2014.08.066

27. A.S. Smirnov, E.S. Butukhanova, N.A. Bokach, G.L. Starova, V.V. Gurzhiy, M.L. Kuznetsov, V.Yu. Kukushkin, "Novel (cyanamide)ZnII complexes and zinc(II)-mediated hydration of the cyanamide ligands", *Dalton Trans.* 2014, 43, 15798-15811. DOI: 10.1039/c4dt01812e
28. M.Ya. Goikhmana, N.P. Yevlampieva, I.V. Podeshvo, S.A. Mil'tsov, V.S. Karavan, I.V. Gofman, A.P. Khurchak, A.V. Yakimansky, "Polymers with Cyanine Chromophore Groups in the Main Chain: Synthesis and Properties", *Polymer Science B*, 2014, 56, 352-359. DOI: 10.1134/S1560090414030051
29. S. Miltsov, V. Karavan, M. Goikhman, I. Podeshvo, S. Gómez-de Pedro, M. Puyol, J. Alonso-Chamarro, "Synthesis of bis-aminosubstituted indocyanine dyes for their use in polymeric compositions". *Dyes and Pigments*, 2014, 109, 34-41. DOI: 10.1016/j.dyepig.2014.05.002
30. M.Ya. Demakova, K.V. Luzyanin, G.L. Starova, V.Yu. Kukushkin, "Facile alternative route to cis-[PtCl₂(PTA)₂] and [PtCl(PTA)₃]Cl (PTA = 1,3,5-triaza-7-phosphaadamantane)", *Inorg. Chem. Commun.*, 2014, 50, 17-18. DOI: 10.1016/j.inoche.2014.10.002
31. D.S. Bolotin, K.I. Kulish, N.A. Bokach, G.L. Starova, V.V. Gurzhiy, V.Yu. Kukushkin, "Zinc(II)-Mediated Nitrile–Amidoxime Coupling Gives New Insights into H⁺-Assisted Generation of 1,2,4-Oxadiazoles", *Inorg. Chem.*, 2014, 53, 10312-10324. DOI: 10.1021/ic501333s
32. T.B. Anisimova, M. Fátima C. Guedes da Silva, V.Yu. Kukushkin, A.J. L. Pombeiro, K.V. Luzyanin, "Metal-mediated coupling of amino acid esters with isocyanides leading to new chiral acyclic aminocarbene complexes", *Dalton Trans.*, 2014, 43, 15861-15871. DOI: 10.1039/c4dt01917b
33. A.N. Kazakova, R.O. Iakovenko, V.M. Muzalevskiy, I.A. Boyarskaya, M.S. Avdontceva, G.L. Starova, A.V. Vasilyev, V.G. Nenajdenko, "Trifluoromethylated allyl alcohols: acid-promoted reactions with arenes and unusual 'dimerization'", *Tetrahedron Lett.*, 2014, 55, 6851-6855. DOI: 10.1016/j.tetlet.2014.10.083
34. A.F. Khlebnikov, M.S. Novikov, Y.G. Gorbunova, E.E. Galenko, K.I. Mikhailov, V.V. Pakalnis, M.S. Avdontceva, "Isoxazolium N-ylides and 1-oxa-5-azahexa-1,3,5-trienes on the way from isoxazoles to 2H-1,3-oxazines", *Beilstein J. Org. Chem.*, 2014, 10, 1896-1905. DOI:10.3762/bjoc.10.197
35. A.F. Khlebnikov, M.S. Novikov, V.V. Pakalnis, R.O. Iakovenko, D.S. Yufit, "Domino reactions of 2H-azirines with acylketenes from furan-2,3-diones: Competition between the formation of ortho-fused and bridged heterocyclic systems", *Beilstein J. Org. Chem.*, 2014, 10, 784-793. DOI:10.3762/bjoc.10.74
36. A.S. Konev, A.F. Khlebnikov, P.I. Prolubnikov, A.S. Mereshchenko, A.V. Povolotskiy, O.V. Levin, A. Hirsch, "Synthesis of New Porphyrin–Fullerene Dyads Capable of Forming Charge-Separated States on a Microsecond Lifetime Scale", *Chem. Eur. J.*, 2014, 20,1-15. DOI: 10.1002/chem.201404435
37. N.A. Danilkina, A.E. Kulyashova, A.F. Khlebnikov, S. Bräse, I.A. Balova, "Electrophilic Cyclization of Aryldiacetylenes in the Synthesis of Functionalized Eneidyne Fused to a Heterocyclic Core", *J. Org. Chem.*, 2014, 79(19), 9018-9045. DOI: 10.1021/jo501396s
38. A.F. Khlebnikov, O.A. Tomashenko, L.D. Funt, M.S. Novikov, "Simple Approach to Pyrrolylimidazole Derivatives by Azirine Ring Expansion with Imidazolium Ylides", *Org. Biomol. Chem.*, 2014, 12, 6598-6609. DOI: 10.1039/c4ob00865k
39. A.S. Konev, D.A. Lukyanov, P.S. Vlasov, O.V. Levin, A.A. Virtsev, I.M. Kislyakov, A.F. Khlebnikov, "The Implication of 1,3-Dipolar Cycloaddition of Azomethine Ylides to the Synthesis of Main-Chain Porphyrin Oligomers", *Macromol. Chem. Phys.*, 2014, 215, 516-529. DOI: 10.1002/macp.201300679
40. A.F. Khlebnikov, A.S. Konev, A.A. Virtsev, D.S. Yufit, G. Młostoń, H. Heimgartner, "Concerted vs. Non-Concerted 1,3-Dipolar Cycloadditions of Azomethine Ylides to Electron-Deficient Dialkyl 2,3-Dicyanobut-2-enedioates", *Helv. Chim. Acta.*, 2014, 97, 453-470. DOI: 10.1002/hlca.201300405
41. K.V. Zavyalov, M.S. Novikov, A.F. Khlebnikov, V.V. Pakalnis, "Selective syntheses of 2H-1,3-oxazines and 1H-pyrrol-3(2H)-ones via temperature-dependent Rh(II)-carbenoid-mediated 2H-azirine ring expansion", *Tetrahedron*, 2014, 70(21), 3377-3384. DOI: 10.1016/j.tet.2014.03.101
42. P.V. Gushchin, M.L. Kuznetsov, M. Haukka, V.Yu. Kukushkin, "Anionic halide-alcohol clusters in the solid state", *J. Phys. Chem. A*, 2014, 118, 9529-9539. DOI: 10.1021/jp506256a
43. A.E. Kulyashova, E.V. Mikheeva, N.A. Danilkina, I.A. Balova, "Synthesis of 2-(buta-1,3-dienyl)-N,N-dimethylanilines using reductive methylation step", *Mendeleev Commun.*, 2014, 24, 102-104. DOI: 10.1016/j.mencom.2014.03.013
44. A.П. Молчанов, Q.T. Tran, A.B. Степаков, Г.Л. Старова, P.P. Костиков, «Regioselective cycloaddition of C-carbamoylnitrones to methyl (E)-2-(2-phenylcyclopropylidene)acetate and methyl (E)-2-methylidene-3-phenylcyclopropane-1-carboxylate», *Russ. J. Org. Chem.*, 2014, 50, 78-82 (russ. 84-88). DOI: 10.1134/S1070428014010151
45. A.V. Stepakov, A.G. Larina, V.M. Boitsov, A.P. Molchanov, "Reaction of 6,6-dimethylfulvene with aromatic imines in the presence of Lewis acids", *Russ. J. Org. Chem.*, 2014, 50, 389-393 (russ. 404-408). DOI: 10.1134/S1070428014030154
46. T.M. Dau, Y.-A. Chen, A.J. Karttunen, E.V. Grachova, S.P. Tunik, K.-T. Lin, W.-Y. Hung, P.-T. Chou, T.A. Pakkanen, I.O. Koshevoy, "Tetragold(I) Complexes: Solution Isomerization and Tunable Solid-State Luminescence", *Inorg. Chem.*, 2014, 53, 9478-9488. DOI: 10.1021/ic501470v
47. A.S. Pankova, M.A. Samartsev, I.A. Shulgin, P.R. Golubev, M.A. Kuznetsov, "Synthesis of thiazolidines via regioselective addition of unsymmetric thioureas to maleic acid derivatives", *RSC Advances*, 2014, 4, 51780-51786. DOI 10.1039/c4ra07840c

НАШИ ПАРТНЁРЫ

В РОССИИ



Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург
Санкт-Петербургский государственный технологический университет растительных полимеров, Санкт-Петербург
Радиевый институт им. В.Г. Хлопина, Санкт-Петербург
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск
Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва
Балтийский государственный университет им. И. Канта, Калининград
Казанский государственный университет, Казань
Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону
Мурманский государственный технический университет, Мурманск
Ярославский государственный университет, Ярославль
Кубанский государственный университет, Краснодар
Иркутский институт химии СО РАН, Иркутск
Южноуральский государственный университет, Челябинск

ПО ВСЕМУ МИРУ



Institute of Biochemistry, Ernst-Moritz-Arndt University of Greifswald, Germany
Institute of Chemistry and Pharmacology, University of Regensburg, Germany
Institute of Chemistry and Biochemistry, Free University of Berlin, Germany
Max-Born Institute of Non-Linear Optics and Short Pulse Spectroscopy, Berlin, Germany
Martin-Luther University, Halle-Wittenberg, Germany
Leibnitz Institute of Molecular Pharmacology, Berlin, Germany
CIC energigune Research Center, Vitoria, Spain
Exact Sciences and Engineering Center, University of Guadalajara, Mexico
Department of Chemistry, University of Wroclaw, Poland
Department of Chemistry, University of Wroclaw, Poland
Wroclaw University of Technology, Poland
Ben-Gurion University in Negev, Beer-Sheva, Israel
Free State University, Bloemfontein, South Africa

МЕЖВУЗОВСКОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО:
УСЛОВИЯ ДЛЯ РАБОТЫ ПО СОВМЕСТНЫМ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИМ ПРОЕКТАМ

Офисные помещения



Рабочие места для гостей центра



Общая комната / кухня



Места для отдыха



Химическая лаборатория для
пробоподготовки



Вытяжные шкафы



Ротор. испарители



Вакуумная линия



Аналитические весы





ОТДЕЛ КВАНТОВЫХ МАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ Санкт-Петербургский государственный университет



ИСТОРИЯ

Первые исследования в области квантовой радиофизики проводились на кафедре радиофизики в 1949–1957 гг. под руководством профессора Льва Леонидовича Мясникова. Они были посвящены изучению инверсионных спектров аммиака методом микроволновой газовой радиоспектроскопии, а затем разработке методики ядерного магнитного резонанса на атомных пучках. Большую роль в развитии радиоспектроскопии конденсированных сред на кафедре сыграл талантливый ученый – доцент Федор Иванович Скрипов, возглавлявший лабораторию квантовой радиофизики с 1952 по 1961 год. Под его руководством впервые в СССР начали проводиться работы в области ядерного магнитного резонанса в магнитном поле Земли.

В 1993 году преподаватели и научные сотрудники решили объединиться в самостоятельное структурное подразделение в рамках Физического учебно-научного центра (ФУНЦ): КАФЕДРУ И ОТДЕЛ КВАНТОВЫХ МАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ. Инициатива была одобрена на заседании кафедры радиофизики и получила поддержку на Ученых советах физического факультета и СПбГУ. Заведующим кафедрой и отделом был избран профессор Владимир Иванович Чижик.

С 2014 года кафедра вошла в состав новой объединённой кафедры СПбГУ – кафедры ядерно-физических методов исследований (при сохранении отдела квантовых магнитных явлений в научном секторе деятельности).

КНИГИ

- V.I. Chizhik, Y.S. Chernyshev, A.V. Donets, V. Frolov, A. Komolkin, M.G. Shelyapina. *Magnetic Resonance and Its Applications*, 2014, Springer-Verlag. 782 p.
- Квантовая радиофизика. Магнитный резонанс и его приложения. СПб, 2009. Изд. 2-е, испр. и доп. 706 с. Под ред. В.И. Чижика (Коллектив авторов).
- В.И. Чижик. Ядерная магнитная релаксация. СПб, 2004. Изд. 3-е. 388 с.
- П.М. Бородин, А.В. Мельников, А.А. Морозов, Ю.С. Чернышев. Ядерный магнитный резонанс в земном поле. Изд. Ленинградского Университета, 1967, 230 с.
- Изучение физических принципов ядерной магнитно-резонансной томографии. В кн.: Практикум по магнитному резонансу. Учебное пособие. Ред. Чижик В.И. Изд-во С.-Петербургского университета, 2003, 84 с.

ОБОРУДОВАНИЕ

1. Универсальный спектрометр ЯМР на диапазон частот 4–100МГц на базе электромагнита BRUKER SXP 4-100 и системы управления и сбора данных фирмы «ТЕХПРИБОР», СПб. Назначение – измерение времен релаксации и коэффициентов самодиффузии.
2. Импульсный релаксометр «ЭХО-12» для измерения времен релаксации и коэффициентов самодиффузии на частоте 20МГц в поле постоянного магнита.
3. Спектрометр ЯМР широких линий в кристаллах на частоте 40 МГц на основе электромагнита РЯ2301.
4. Низкочастотный ЯМР – томограф - спектрометр на частоте 0.3 МГц.
5. Спектрометр ЯМР в магнитном поле Земли.



Д.ф.-м.н., профессор **Чижик Владимир Иванович**

v.chizhik@spbu.ru

Тел. 8(812)4287559

Область научных интересов: ядерная магнитная релаксация, ядерный магнитный резонанс, микроструктура жидких систем (в том числе, гетерогенных).



К.ф.-м.н., доцент **Шеляпина Марина Германовна**

marina.shelyapina@spbu.ru

Тел. 8(812)4284469

Область научных интересов: исследования ориентационной подвижности макромолекул различными методами: теория, компьютерное моделирование, ЯМР эксперимент.



Зав. лабораторией **Чернышев Юрий Сергеевич**

cherni@nmr.phys.spbu.ru

Тел. 8(812)4284362

Область научных интересов: молекулярная подвижность, структура и агрегация амфифильных молекул в растворах и на границе раздела раствор-твердое тело, экспериментальные методы ЯМР.



К.ф.-м.н., с.н.с. **Матвеев Владимир Викторович**

vmatveev@nmr.phys.spbu.ru

Тел. 8(812)4284469

Область научных интересов: изучение методом ЯМР (спектры, релаксация, диффузия) неорганических ионных жидкостей, исследование методом ЯМР новых наноструктурированных материалов, включая магнитные нанокompозиты и объемные магнитные наноматериалы.



К.ф.-м.н., доцент **Фролов Вячеслав Вячеславович**

vfrolov@bk.ru

Область научных интересов: физика магнитных явлений, ядерный магнитный резонанс.



К.ф.-м.н., с.н.с. **Тютюкин Константин Викторович**

kos101@mail.ru

Область научных интересов: магнитный Резонанс, Томография, ЯМР-диффузометрия.



К.ф.-м.н., доцент **Комолкин Андрей Владимирович**

komolkin@nmr.phys.spbu.ru

Тел. 8(812)4284479

Область научных интересов: жидкие кристаллы, биологические системы, магниторецепция и навигация перелётных птиц, компьютерное моделирование молекулярной динамики, квантовая химия, высокопроизводительные вычисления.



Н.с. Иевлев Александр Вячеславович

a.ievlev@spbu.ru

тел. 8(812)4289948

skype: badsid_aliev

Область научных интересов: исследование подвижности молекул и ионов в растворах, дисперсиях и коллоидных системах, ЯМР-релаксация, диффузометрия; ионные жидкости, эндометаллофулеренолы, гидриды металлов.



К.ф.-м.н., доцент Донец Алексей Валерьевич

aldonets@mail.ru

Область научных интересов: исследование микроструктуры водных растворов биологических молекул, а так же микроструктуры растворов методами ЯМР, молекулярной динамики и квантовой химии, разработка диагностики состава веществ в закрытых контейнерах на основе ЯМР.



Аспирант Куприянов Павел Алексеевич

scleroze@mail.ru

Тел. 8(812)4284479

Область научных интересов: применение методов магнитного резонанса в магнитном поле земли, разработка и автоматизация приборов для работы в низких полях.



К.ф.-м.н., доцент Егоров Андрей Викторович

a.v.egorov@spbu.ru

Тел. 8(812)4284362

Область научных интересов: развитие методов компьютерного моделирования для решения задач физической химии и биофизики, ЯМР, ядерная магнитная релаксация.



К.ф.-м.н., стажер-исследователь Маркелов Денис Анатольевич

markeloved@gmail.com

Область научных интересов: исследования ориентационной подвижности макромолекул различными методами: теория, компьютерное моделирование, ЯМР эксперимент.



Д.и.н. Смекалова Татьяна Николаевна

tmsmek@mail.ru

Область научных интересов: применение методов магнитного резонанса в археологии.



Чудин Андрей Викторович

andrei.chudin@gmail.com

Область научных интересов: дистанционные методы, неразрушающие методы, магнитометрия, археология, ГИС, геофизические методы, керамическое производство.

Чижи́к Влади́мир Ива́нович

Д. ф.-м. н. (1982), профессор (1986), Заслуженный деятель науки РФ (2005), член комитета Международного научного общества AMPERE (2006).

Основные научные направления и методы: ядерный магнитный резонанс, ядерная магнитная релаксация, микроструктура жидких систем (в том числе, гетерогенных), различные методики регистрации и интерпретации данных ЯМР (в том числе, с применением квантово-химических расчётов и метода молекулярной динамики), ЯМР в магнитном поле Земли.

Основные читаемые курсы лекций: ядерный магнитный резонанс (58 часов, 3-ий курс бакалавриата), квантовая радиоэлектроника (30 часов, 4-ый курс бакалавриата), ядерная магнитная релаксация (30 часов, 1-ый курс магистратуры.), прикладная спектроскопия магнитного резонанса (30 часов, 1-ый курс магистратуры), ядерный магнитный резонанс в твердых телах (30 часов, 2-ой курс магистратуры)

Студенты и аспиранты, обучающиеся в настоящее время, и их темы выпускных работ:

Харьков Борис, асп. 3 года, «Перенос поляризации и гетероядерные взаимодействия в частично упорядоченных фазах поверхностно-активных веществ»

Егорова Мария, асп. 2 года, «Микроструктура концентрированных водных растворов по данным метода молекулярной динамики»

Куприянов Павел, асп. 2 года, «Развитие методов ЯМР в магнитном поле Земли»

Быстров Сергей, маг. 2 курса, «Процессы самоагрегации в растворах ионных жидкостей»

Сократилин Сергей, маг. 1 курса, «Релаксационная эффективность ионов гадолиния и железа в водных растворах модифицированных фуллеренов»

Избранные публикации последних лет:

- V.I. Chizhik, P.A. Kupriyanov, G.V. Mozzhukhin. On question of possibilities of NMR in weak magnetic field for detection of illicit liquids // *Nanotechnology in the Security Systems / Bonca Janez, Kruchinin Sergei (Eds.). - (NATO Science for Peace and Security. Series C: Environmental Security). Springer-Verlag, 2016. — 286, 151-164 P.*

- E. Balci, B. Rameev, H. Acar, G.V. Mozzhukhin, B. Aktas, B. Colak, P.A. Kupriyanov, A.V. Ievlev, Y.S. Chernyshev, V.I. Chizhik. Development of Earth's Field Nuclear Magnetic Resonance (EFNMR) Technique for Applications in Security Scanning Devices // *Applied Magnetic Resonance, 2016. Vol. 47, Issue 1, p. 87–99.*

- S.O. Rabdano, A.V. Donets, M.A. Vovk, D. Michel, V.I. Chizhik, "Hydration Shells" of CH₂ Groups of ω-Amino Acids as Studied by Deuteron NMR Relaxation // *J. Phys. Chem. B, 2015, 119 (42), pp 13358–13366.*

- V.I. Chizhik, I.A. Rykov, M.G. Shelyapina, D. Fruchart. Proton relaxation and hydrogen mobility in Ti–V–Cr alloys: Improved exchange model // *International Journal of Hydrogen Energy, 2014. Vol. 39, № 30. P. 17416–17421.*

- B.B. Kharkov, V.I. Chizhik, S.V. Dvinskikh Probing Molecular Mobility in Nanostructured Composites by Heteronuclear Dipolar NMR Spectroscopy // *Journal of Physical Chemistry C, 2014. Vol. 118, № 48. P. 28308–28313.*

- V.I. Chizhik, P.A. Kupriyanov, G.V. Mozzhukhin. NMR in Magnetic Field of the Earth: Pre-Polarization of Nuclei with Alternating Magnetic Field // *Applied Magnetic Resonance, 2014, Vol. 45, Issue 7, p. 641–651.*

- V.V. Matveev, D.A. Markelov, E.A. Brui, V.I. Chizhik, P. Ingmand, E. Lahderanta. ¹³C NMR relaxation and reorientation dynamics in imidazolium-based ionic liquids: revising interpretation // *Phys. Chem. Chem. Phys., 2014, v. 16, № 22, p. 10480.*

- E. Kurenkova, A. Vyvodtseva, M. G. Shelyapina, V.I. Chizhik, A.V. Ievlev, N.Ye. Skryabina, A.G. Aleksanyan, D. Fruchart. ¹H NMR Study of Hydrogen Site Occupancy in Hydrides of Disordered Ti-V and Ti-V-Cr Alloys. *Solid State Phen. 194, 2013, 254.*

- B.B. Kharkov, V.I. Chizhik, S.V. Dvinskikh. Low rf power high resolution ¹H–¹³C–¹⁴N separated local field spectroscopy in lyotropic mesophases. *J. Magn. Reson. 223 (2012) 73–79.*

- В.И. Чижи́к. К вопросу о теоретическом описании ядерной магнитной релаксации в системе двух эквивалентных спинов. *Вестник Санкт-Петербургского университета, Серия 4, Выпуск 3, 2012, Сентябрь, ФИЗИКА-ХИМИЯ, 136-139.*

- B.B. Kharkov, V.I. Chizhik, S.V. Dvinskikh. Sign-sensitive determination of heteronuclear dipolar coupling to spin-1 by selective decoupling. *Journal of Chemical Physics. 2012, Dec 21;137(23):234902.*

- В.С. Касперович, Б.Б. Харьков, И.А. Рыков, С.А. Лавров, М.Г. Шеляпина, Ю.С. Чернышев, В.И. Чижи́к, Н.Е. Скрыбина, Д. Fruchart, S. Miraglia. Спин-решётчатая релаксация и подвижность протонов в решетке сплава TiV_{0.8}Cr_{1.2}. *Физика твердого тела, 53 (2011) 214-221.*

- V.I. Chizhik, V.S. Kasperovich, M.G. Shelyapina, Yu. S. Chernyshev. Exchange model for proton relaxation in disordered metallic hydrides. *International Journal of Hydrogen Energy, Volume 36, Issue 2, January 2011, Pages 1601-1605*

- A. Donets, V. Chizhik. Influence of temperature on hydration-shell microstructure of chlorine and bromine anions in aqueous solution. *Structural Chemistry, Vol. 22, 465-470 (2011).*

- М.А. Вовк, М.С. Павлова, В.И. Чижи́к, А.А. Воронцова. Модели гидратных оболочек ацетат-иона по данным ядерной магнитной релаксации и квантово-химических расчетов. *Журнал физической химии. 2011. Т. 85. № 9. С. 1715-1720.*

Комолкин Андрей Владимирович

доцент (доцент по кафедре), к. ф.-м. н. (01.04.03 «Радиофизика»), директор института ядерной физики и ядерных методов исследования физического факультета СПбГУ.

Область научных интересов: жидкие кристаллы, биологические системы, магниторецепция и навигация перелётных птиц, компьютерное моделирование молекулярной динамики, квантовая химия, высокопроизводительные вычисления.

Награды и премии: «Почетный работник высшего профессионального образования Российской Федерации» (отраслевая награда Министерства образования и науки РФ за заслуги в области образования – нагрудный знак).

Преподавательская деятельность: поточные лекции на 2 и 4 курсе бакалавриата «прикладная математика и физика», лекции и практические занятия в магистратуре, куратор магистерского профиля «Экспериментальная физика»

Книги и учебные пособия:

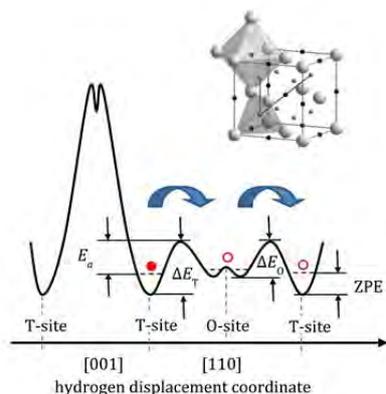
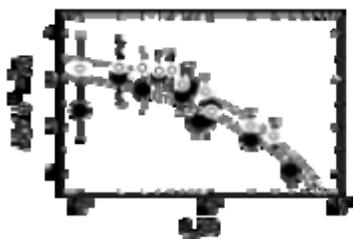
1. А.В. Комолкин, А.В. Егоров. Теория спектров ядерного магнитного резонанса: уч.-мет. пособие. – СПб.: Изд-во СПбГУ, 2013. – 52 с.
2. А. В. Егоров, А. В. Комолкин. Компьютерное моделирование процессов ядерной магнитной релаксации в жидкостях: уч.-мет. пособие. – СПб.: Изд-во СПбГУ, 2013. – 36 с.
3. А. В. Комолкин. Теория спектров ядерного магнитного резонанса: уч.-мет. пособие. – СПб: Изд-во «Соло», 2011. – 44 с.
4. П.М. Бородин, Н.М. Вечерухин, В.С. Касперович, А.В. Комолкин, А.В. Мельников, В.В. Москалев, В.В. Фролов, Ю.С. Чернышев, В.И. Чижик, М.Г. Шеляпина. Квантовая радиофизика: магнитный резонанс и его приложения. Учебное пособие (2-е издание, переработанное). – СПб: Санкт-Петербургский гос. университет, 2009. – 700 С.
5. Ю. С. Чернышев, А. В. Комолкин, Н. М. Вечерухин. Ядерная магнитная релаксация и импульсный ядерный магнитный резонанс: учеб.-метод. пособие. – СПб.: Издательство «Соло», 2007. 70 с.
6. А. В. Комолкин, М. Г. Шеляпина. Метод молекулярной динамики: уч.-мет. пособие. – СПб.: Изд-во «Соло», 2007. 72 с.
7. М. Г. Шеляпина, А. В. Комолкин. Неэмпирические методы расчётов кристаллов: учеб.-метод. пособие. – СПб.: Издательство «Соло», 2007. 95 с.
8. С. А. Лавров, К. В. Тютюкин, А. В. Комолкин. Автоматизация эксперимента в пакете LabView: учеб.-метод. пособие. – СПб.: Издательство «Соло», 2007. 100 с.
9. П. М. Бородин, В. С. Касперович, А. В. Мельников и др. Квантовая радиофизика: Учебное пособие / Под редакцией проф. В. И. Чижика. С-Петербург: Издательство СПбГУ, 2004. 689с.
10. П. М. Бородин, С. В. Двинских, В. С. Касперович и др. Практикум по магнитному резонансу.: Учебное пособие / под редакцией проф. В. И. Чижика. – С-Петербург: Издательство СПбГУ, 2003. 184 с. ISBN 5-288-02471-5
11. С. А. Немнюгин, М. П. Чаунин, А. В. Комолкин. Эффективная работа: UNIX. –С-Петербург: Издательство «Питер», 2001. – 688 с. ISBN 5-272-00197-4
12. А. В. Комолкин, С. А. Немнюгин. Программирование для высокопроизводительных ЭВМ: Учеб.-метод. пособие – СПб: Издательство НИИ химии СПбГУ, 1998. – 52 с.
13. В. И. Чижик, В. С. Касперович, А. В. Комолкин, В. И. Михайлов. Магнитный резонанс: Методическое пособие / Под редакцией проф. В. И. Чижика. – С-Петербург: Издательство СПбГУ, 1995. – 79 с.

Избранные публикации последних лет:

1. V.S. Neverov, A.V. Komolkin. Coarse-grain model of the benzene ring with para-substituents in the molecule // J. Chem. Phys., 2012, Vol. 136, No. 9, p. 094102.
2. В.С. Неверов, А.В. Комолкин. Исследование методом молекулярной динамики структурных и термодинамических свойств воды // Химическая физика, 2010, том 29, No. 3, с. 33-42. (Перевод: Neverov V. S., Komolkin A. V. A study of the structural and thermodynamic properties of water by the molecular dynamics method // Russian Journal of Physical Chemistry B, 2010, Vol. 4, No. 2, p. 217-226.
3. Komolkin A. V., Laaksonen A., Maliniak A. Molecular-dynamics simulation of a nematic liquid-crystal // Journal of Chemical Physics. 1994. T. 101. C. 4103.
4. Crain J., Komolkin A. V. Simulating molecular properties of liquid crystals // Advances in Chemical Physics. 1999. T. 109. C. 39-113.

Шеляпина Марина Германовна

Основные направления исследований:



Материалы для хранения водорода

Исследование подвижности водорода в неупорядоченных сплавах переходных металлов – материалах для хранения водорода. Релаксационные и диффузионные измерения. Сочетание метода ^1H ЯМР и расчетов в рамках теории функционала плотности.

M.G. Shelyapina, A.V. Vyvodtceva, K.A. Klyukin, O.O. Bavrina, Yu.S. Chernyshev, A.F. Privalov, D. Fruchart. Hydrogen diffusion in metal-hydrogen systems via NMR and DFT. *Int. J. Hydrogen Energy* **40** (2015) 17038-17050

Список избранных публикаций

- K. Klyukin, M. G. Shelyapina, D. Fruchart, DFT calculations of hydrogen diffusion and phase transformations in magnesium, *J. Alloy Compd.* **644** (2015) 371-377
- M.G. Shelyapina, A.V. Vyvodtceva, K.A. Klyukin, O.O. Bavrina, Yu.S. Chernyshev, A.F. Privalov, D. Fruchart. Hydrogen diffusion in metal-hydrogen systems via NMR and DFT. *Int. J. Hydrogen Energy* **40** (2015) 17038-17050
- V. I. Chizhik, I. A. Rykov, M. G. Shelyapina, Daniel Fruchart, Proton relaxation and hydrogen mobility in Ti-V-Cr alloys: Improved exchange model, *Int. J. Hydrogen Energy* **39**, (2014) 17416-17421
- A.V. Vyvodtceva, M.G. Shelyapina, A.F. Privalov, Yu.S. Chernyshev, D. Fruchart, ^1H NMR study of hydrogen self-diffusion in ternary Ti-V-Cr alloys *J. Alloy Compd.* **614** (2014) 364-367
- K. Klyukin, M. G. Shelyapina, D. Fruchart, Hydrogen induced phase transition in magnesium: An Ab initio study, *J. Alloy Compd.* **580** (2013) S10-S12
- N. Skryabina, D. Fruchart, M.G. Shelyapina, S. Dolukhanyan, A. Aleksanyan, Phase transformations in Ti-V hydrides, *J. Alloy Compd.* **580** (2013) S94-S97
- V.I. Chizhik, V.S. Kasperovich, M.G. Shelyapina, Yu. S. Chernyshev, Exchange model for proton relaxation in disordered metallic hydrides, *Int. J. Hydrogen Energy* **36** (2011) 1601-1605
- V.S. Kasperovich, M.G. Shelyapina, B. Khar'kov, I. Rykov, V. Osipov, E. Kurenkova, A.V. Ievlev, N.E. Skryabina, D. Fruchart, S. Miraglia, P. de Rango, NMR study of metal-hydrogen systems for hydrogen storage, *J. Alloy Compd.* **509** (2011) S804-S808
- M.G. Shelyapina, D. Fruchart, P. Wolfers, Electronic structure and stability of new FCC magnesium hydrides $\text{Mg}_7\text{MH}_{16}$ and $\text{Mg}_6\text{MH}_{16}$ ($M = \text{Ti, V, Nb}$): An ab initio study, *Int. J. Hydrogen Energy* **35** (2010) 2025-2032

Матвеев Владимир Викторович

1. Изучение методами ЯМР неорганических ионных жидкостей.

Целью работы является изучение локальной структуры и молекулярной подвижности в новом типе физико-химических систем: неорганических ионных жидкостях, представляющих смеси ионных жидкостей с неорганическими солями. Исследуемые объекты представляют фундаментальный научный интерес, а также рассматриваются как перспективные электролиты для электрохимических устройств следующего поколения. Основные задачи: получение новых фундаментальных знаний о физико-химических свойствах таких систем и поиск составов электролитов, наиболее перспективных для электрохимических устройств следующего поколения (суперконденсаторы, литиевые и никелевые аккумуляторы и т.п.). Основными объектами исследования на настоящий момент являются смеси нитратов лития, магния, алюминия и др. металлов с протонными ионными жидкостями, такими как нитрат этиламмония и им подобными.

Работа проводится с активным использованием ресурсного центра СПбГУ «Магнито-резонансные методы исследования, МРМИ). Основные измерения проводятся в жидком состоянии, однако используется также и ЯМР в твердом теле. Исследования проводятся в сотрудничестве с рядом зарубежных университетов из Испании, Финляндии, Эстонии и других стран Европы. В работе принимают участие К.В. Тютюкин и А.В. Иевлев

Избранные публикации:

- V.V. Matveev, D.A. Markelov, E. A. Brui, V. I. Chizhik, P. Ingman, E. Lähderanta. ^{13}C NMR relaxation and reorientation dynamics in imidazolium-based ionic liquids: revising interpretation // *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2014, 16, 10480-10484.
- В.В.Матвеев, Д.А. Маркелов, В.И. Чижик, Р. Ингман, Э. Ляхдеранта. Молекулярная подвижность функциональных групп противоионов в ионной жидкости ацетат 3-метил-1-этил-имидазолия по данным ЯМР-релаксации ядер ^1H и ^{13}C . Изв. РАН. Серия хим., 2013, №9, 1985-1990.

2. Исследование методами ЯМР новых наноструктурированных материалов, включая магнитные нанокompозиты и объемные магнитные наноматериалы.

Целью работы является получение новых фундаментальных знаний о физико-химических свойствах новых магнитных материалов и тестирование локальных магнитных свойств материалов, перспективных для прикладных задач (катализаторы на основе кластеров железа, кобальта, никеля; спинтроника, магнитные полупроводники, магнитные рефрижераторы и т.п.). Основными объектами исследования являются (нано)кристаллиты металлических ферромагнитных металлов: кобальта, никеля и железа; никель-содержащие гейслеровые сплавы; наноструктурированные катализаторы, содержащие железо в различных степенях окисления. Работа проводится с активным использованием ресурсных центров СПбГУ. Наиболее активно используемыми методами являются ЯМР в магнитоупорядоченном состоянии и ЯМР твердого тела (РЦ МРМИ), а также СКВИД-магнитометрия. Кроме того, для исследования железо-содержащих соединений активно используется Мёссбауэровская спектроскопия, доступная на основе научного сотрудничества с другими российскими и зарубежными университетами.

Избранные публикации:

- V.A. Ryzhov, I.V. Pleshakov, A.A. Nechitailov, N.V. Glebova, E.N. Pyatyshev, A.V. Malkova, I.A. Kisilev, V.V. Matveev. Magnetic study of nanostructural composite material based on cobalt compounds and porous silicon. – *Applied Magnetic Resonance*, 45, No 4, p. 339-352 (2014).
- V. Matveev, V. Ryzhov, A. Lashkul, A. Mazur, V. Semenov, E. Lähderanta. Study of Magnetic Nanocomposites by NMR and Bulk Magnetization Techniques. // *EPJ Web of Conferences*, 2014. — Vol. 75, — P. 05015..
- O.V. Popkov, G.Yu. Yurkov, Y. A. Ovchenkov, Yu.A. Koksharov, V.V. Matveev, V.M. Bouzник. Synthesis and magnetic properties of nanodiamond aggregates decorated by cobalt-containing nanoparticles. *Rev. Adv. Mater. Sci.*, 32, pp 7-11 (2012).
- V.V. Matveev, D.A. Baranov, G.Yu. Yurkov, N.G. Akatiev, I.P. Dotsenko, S.P. Gubin. Cobalt nanoparticles with preferential hcp structure: A confirmation by X-ray diffraction and NMR. // *Chem.Phys. Lett.*, 422, 402—405 (2006).

Егоров Андрей Викторович

Образование: физфак СПбГУ (1997), к.ф.-м.н. (2000)

Область научных интересов: Развитие методов компьютерного моделирования для решения задач физической химии и биофизики, ЯМР, ядерная магнитная релаксация

Книги и учебные пособия:

1. А. В. Комолкин, А. В. Егоров. Теория спектров ядерного магнитного резонанса: учеб.-метод. пособие. – СПб.: Изд-во СПбГУ, 2013. – 52 с.
2. А. В. Егоров, А. В. Комолкин. Компьютерное моделирование процессов ядерной магнитной релаксации в жидкостях: учеб.-метод. пособие. – СПб.: Изд-во СПбГУ, 2013. 36 с.

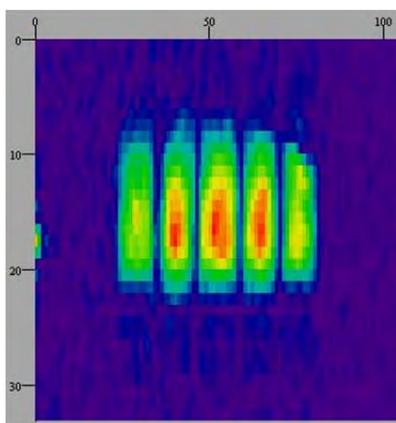
Избранные публикации:

1. Egorov A.V., Komolkin A.V., Chizhik V.I., Yushmanov P.V., Lyubartsev A.P., Laaksonen A. Temperature and Concentration Effects on Li⁺-Ion Hydration. A Molecular Dynamics Simulation Study // J. Phys. Chem. B, 2003, Vol. 107, No. 14, pp. 3234-3242.
2. Egorov A.V., Brodskaya E.N., Laaksonen A. Effect of ions on solid-liquid phase transition in small water clusters. Molecular dynamics simulation study // J. Chem. Phys., 2003, Vol. 118, No. 4, pp. 6380-6386.
3. Egorov A.V., Lyubartsev A.P., Laaksonen A. Molecular dynamics simulation study of glycerol-water liquid mixtures // J. Phys. Chem. B, 2011, Vol. 115, No. 14, pp. 14572-14581.

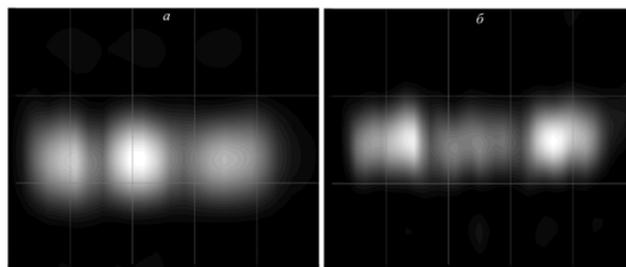
Фролов Вячеслав Вячеславович, Тютюкин Константин Викторович

В отделе кантовых магнитных явлений имеется научная группа ядерной магнитнорезонансной томографии в слабом магнитном поле (МРТСП) в составе с. н. с. Константина Викторовича Тютюкина и доцента Вячеслава Вячеславовича Фролова. Рутинные исследования в области МРТСП нигде не проводятся, и аппаратура для них серийно не выпускается, однако, интерес к этой области не угасает, в частности, из-за высокой экономичности метода, развития высокотехнологичных методов усиления сигналов ЯМР и легкости выполнения модельных томографических экспериментов.

Исследования проводятся на "Home-built" томографе с магнитным полем до 10 мТл. Аппаратная часть позволяет получать произвольные импульсные программы для регистрации ЯМР-изображений, включая эксперименты по двойному резонансу. Основные направления исследований: визуализация молекулярного движения, в т.ч. диффузии, и потоков; повышение информативности МРТ путем использования двойного резонанса и переноса намагниченности; томография пористых сред. Во всех исследованиях принимают участие студенты профилей "экспериментальная физика", "магнитный резонанс: физические основы и применения", "томографические технологии в современной медицинской диагностике" и аспиранты направлений "магнитные явления" и "физика конденсированного состояния".

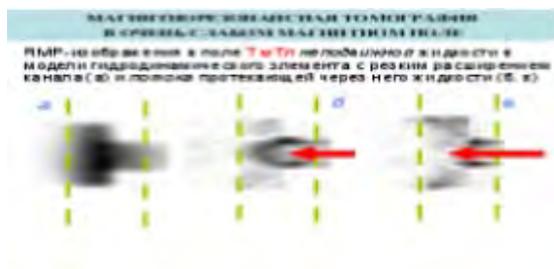


Протонное изображение сечения секционированного образца в поле 6,8 мТл.

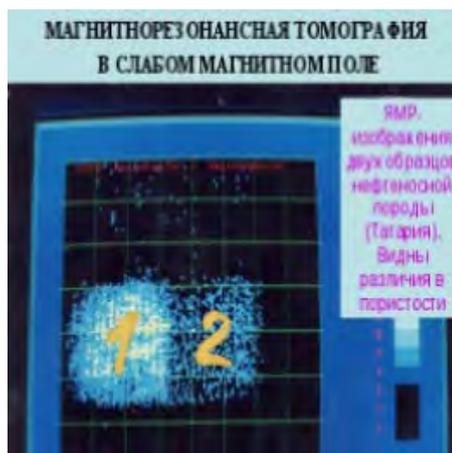


Диффузионное взвешивание на примере фантома из трех секций (в центре ацетон, по краям - вода). а - без

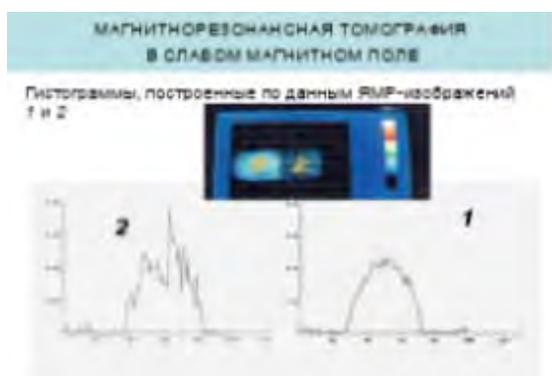
взвешивания, б- с диффузионным взвешиванием.



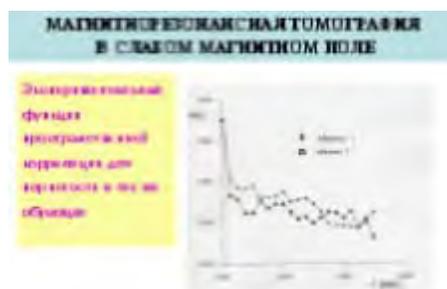
ЯМР-изображения в поле 7 мТл неподвижной жидкости в модели гидродинамического элемента с резким расширением канала (а) и потока протекающей через него жидкости (б, в)



ЯМР-изображения в поле 0,15 мТл двух образцов нефтеносной породы (Татария). Видны различия в пористости



Гистограммы, построенные по данным ЯМР-изображений 1 и 2



Экспериментальные функции пространственной корреляции для пористости в тех же образцах

Избранные публикации последних лет:

- Ю.В.Богачев, М.Н.Князев, Я.Ю.Марченко, А.Н.Наумова, К.В.Тютюкин, В.А.Фокин, В.В.Фролов, Ю.С.Черненко. Диагностический магнитный резонанс. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ»-2013., 240 с. ISBN 978-5-7629-1002-6.
- Ю.В. Богачев, В.З. Драпкин, М.Н. Князев, Е.П. Попечителей, И.В. Разин, В.В. Фролов. Магнитнорезонансная томография в слабом магнитном поле. СПб: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ»-2012. 260 с. ISBN 978-5-7629-1267-9.
- С.В. Иевлева, Н.В. Лужецкая, К.В. Тютюкин, В.В. Фролов. Получение диффузионно-взвешенных изображений в очень слабом магнитном поле. Вестник СПбГУ. Сер. 4. 2016. Вып. 2.
- Фролов В.В. Физика ЯМР-визуализации. Материалы 11-й Зимней Молодежной школы-конференции «Магнитный резонанс и его приложения (SPINUS)». СПб, 30 ноя. – 6 дек. 2014 г. - С. 51-52
- Зубков М.А., Черемисин В.М. Артефакты и оптимизация импульсных последовательностей в практической МР-томографии. Материалы 7-й Зимней молодежной школы-конференции «Магнитный резонанс и его приложения». СПб, 28 ноября – 4 декабря 2010 г. С.75.
- Bruy A., Tutukin K.V., Semenova N.G. Low-field MRI research of fluid motion for the purpose of acoustic flow images. International Symposium and Summer Scool in Saint Petersburg “Nuclear Magnetic Resonance”, 7th Meeting. 28 June -2 July 2010. Book of Abstracts. Saint Petersburg, Russia. 2010. P. 64.
- Iljina O., Frolov V. Fresnel transform and concomittant gradients in NMR imaging. International Symposium and Summer Scool in Saint Petersburg “Nuclear Magnetic Resonance”, 9th Meeting. 9–13 July 2012. Saint Petersburg, Russia. 2012. P. 88.
- Riabchun F., Frolov V. Field-shifting method for magnetization transfer contrast in low-field (6.8 mT) magnetic resonance imaging. International Symposium and Summer Scool in Saint Petersburg “Nuclear Magnetic Resonance”, 10th Meeting. 8 – 12 July 2013. Book of Abstracts. Saint Petersburg, Russia. 2013. P. 105.
- Furman D.M., Frolov V.V. Opportunity to enhance the contrast of MR images using dynamic nuclear polarization in low magnetic fields. International Symposium and Summer Scool in Saint Petersburg “Nuclear Magnetic Resonance”, 11th Meeting. 7 – 11 July 2014. Book of Abstracts. Saint Petersburg, Russia. 2014. P. 46. ISBN 978-5-9651-0844-2.

Донец Алексей Валерьевич

к. ф.-м. н. (специальность 01.04.11 «Физика конденсированного состояния»)

2007–2015 член орг. комитета (2012–2014 – председатель) Зимней молодежной конференции Spinus "Magnetic resonance and its applications"

2011–2014 член орг. комитета конференции «Nuclear Magnetic Resonance in Condensed Matter»

2013–2016 Председатель Совета Молодых Ученых Физического факультете СПбГУ

Область научных интересов: исследование микроструктуры водных растворов биомолекул, а так же микроструктуры растворов методами ЯМР, молекулярной динамики и квантовой химии, разработка диагностики состава веществ в закрытых контейнерах на основе ЯМР

Бакалаврские ВКР:

Джамбулатов Р.Г. «Изучение свойств гидратации функциональных групп карбоновых кислот в водных растворах методами ЯМР-релаксации и квантовой химии»

Магистерские диссертации

Рабдано С.О. «Изучение свойств гидратации функциональных групп карбоновых кислот в водных растворах методами ямр-релаксации и квантовой химии»

Курников С.Е. «Особенности квадрупольной релаксации ядер ионов в сложных водно-солевых растворах белков и ионогенных ПАВ»

Алтынбаев Е.В. «Изучение свойств гидратации аминокислот в водно-солевых растворах методами ЯМР и квантово-химических расчетов»

Чернышев Юрий Сергеевич

Образование: физфак СПбГУ, 1959.

Область научных интересов: Молекулярная подвижность, структура и агрегация амфифильных молекул в растворах и на границе раздела раствор-твердое тело, экспериментальные методы ЯМР.

Книги и учебные пособия (соавтор):

- «Квантовая радиофизика», учебное пособие под ред. В.И.Чижика, изд. СПбГУ, 2004, 688 с.
- Chizhik V. I., Chernyshev Yu. S., Donets A. V., Frolov V., Komolkin A., Shelyapina M. G. Magnetic Resonance and Its Applications . Springer, 2014, 782 p.
- Богачев Ю.В., Грунин Л.Ю., Князев М.Н., Фролов В.В., Чернышев Ю.С. Магнитный резонанс. Основы и применения. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2014, 180 с.
- Практикум по магнитному резонансу. Учебное пособие. / под ред. проф. В. И. Чижика – СПб: изд-во СПбГУ, 2003. 184 с.
- П.М.Бородин, А.В.Мельников, А.А.Морозов, Ю.С.Чернышев. Ядерный магнитный резонанс в земном поле. Изд. Ленинградского Университета, 1967, 230с.

Избранные публикации:

1. Popova, M.V.; Chernyshev, Y.S.; Michel, D., The Influence of Surfactant Self-Association on ²³Na Relaxation in Aqueous Solutions and Silica Aqueous Dispersions, Applied Magnetic Resonance Volume: 45 Issue: 4 Pages: 365-374 Published: 2014
2. A.V. Vyvodtseva, M.G. Shelyapina, A.F. Privalov, Yu.S. Chernyshev, D. Fruchart 1H NMR study of hydrogen self-diffusion in ternary Ti-V-Cr alloys, Journal of Alloys and Compounds 2014
3. M.V. Popova, Y. S. Tchernyshev, D. Michel 13C NMR study of the influence of the Aerosil surface charge on the short-chain surfactant adsorption // Colloid and Polymer Science, 2006.

Куприянов Павел Алексеевич

Сотрудник лаборатории спектрометрии ЯМР высокого разрешения и релаксометрии в слабых полях и в поле Земли.

В распоряжении лаборатории имеется учебно-научная база «Старорусская», где также проходят студенческие практики. Место для базы (примерно 200 км от Санкт-Петербурга) выбрано с учётом оптимальных условий для регистрации ЯМР в земном поле, таких как минимум промышленных помех и высокая однородность магнитного поля Земли. На территории базы расположен уникальный немагнитный павильон, в котором располагаются датчики и «скамья» из немагнитного металла для организации экспериментов по динамике жидкостей. В павильоне возможна установка оборудования, не оказывающего заметного влияния на сигнал ЯМР. Для регистрации сигнала используется прототип прибора «Релаксометр в земном поле». На учебно-научной базе «Старорусская» совместно с лабораторией проводятся междисциплинарные исследования влияния флуктуаций магнитного поля Земли на физические системы.

В лаборатории разработан и реализован прибор «Релаксометр-спектрометр в земном поле», работающий в лабораторных условиях, т.е. в условиях неоднородного поля Земли и в присутствии промышленных помех. Разработан в теории и технически реализуется метод предварительной поляризации образца переменным магнитным полем. Ведется работа над созданием прибора, свободного от влияния флуктуаций земного поля для экспериментов по спектрометрии высокого разрешения с возможностью регистрации протонного сигнала ЯМР от спин-спиновых взаимодействий ^1H с ядрами ^{13}C .

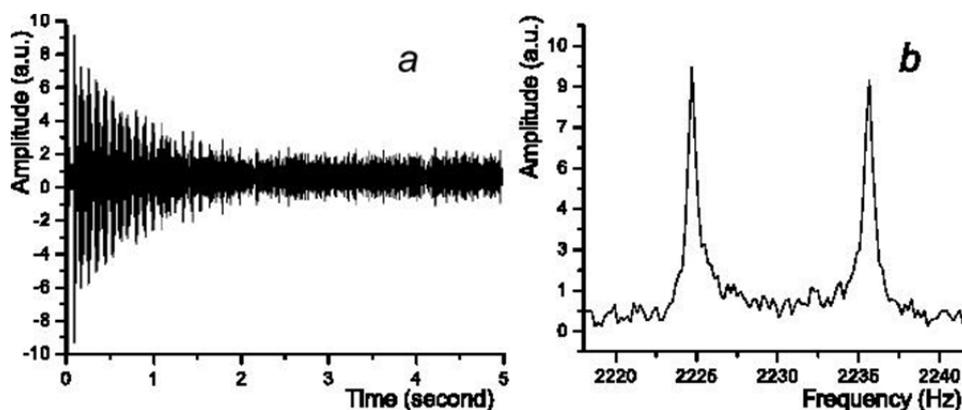
Бородин П.М., Вечерухин Н.М.. Релаксометр ЯМР в земном поле. Научное приборостроение. 1998



Студенты и преподаватели на практике



Датчик в экранирующем кубе лабораторного релаксометра-спектрометра в земном поле



Сигнал ЯМР в земном поле триметилфосфата и его спектр

Иевлев Александр Вячеславович (Археофизика)

Образование: магистр физики

Опыт работы: проведение спецлабораторного практикума, автоматизация ЯМР-спектрометров, чтение курса лекций «Квантовая радиофизика», разработка и модернизация узлов приборов для ЯМР.

Область научных интересов: исследование подвижности молекул и ионов в растворах, дисперсиях и коллоидных системах, ЯМР-релаксация, диффузометрия; ионные жидкости, эндометаллофулерены, гидриды металлов.

Преподавательская деятельность (лекции):

1. Экспериментальные и вычислительные методы магнитного резонанса. (60 часов лекций + 30 часов семинары, 3 курс бакалавриата, 6 семестр, модуль «прикладная математика и физика»).
2. Квантовая радиофизика. (32 часа 4 курс бакалавриата 7 семестр модуль физика).

Должность: научный сотрудник.

Другая профессиональная активность: профориентационная работа с школьниками (факультатив по физике в лицее №419).

Избранные публикации:

1. Erdem Balci, Bulat Rameev, Hakkı Acar1, Georgy V. Mozhukhin, Bekir Aktas, Bektas C, olak, Pavel A. Kupriyanov, Alexander V. Ievlev, Yury S. Chernyshev, Vladimir I. Chizhik Development of Earth's Field Nuclear Magnetic Resonance (EFNMR) Technique for Applications in Security Scanning Devices Applied Magnetic Resonance 2015 год
2. Elena Kurenkova, Anna Vyvoldtseva, Marina G. Shelyapina, Vladimir I. Chizhik, Alexandr V. Ievlev, Nataliya Ye. Skryabina, Anahit G. Aleksanyan, Daniel Fruchart⁸¹H NMR Study of Hydrogen Site Occupancy in Hydrides of Disordered Ti-V and Ti-V-Cr Alloys Diffusion and Defect Data Pt.B: Solid State Phenomena 2013 год
3. V.S. Kasperovich, M.G. Shelyapina, B. Khar'kov, I. Rykov, V. Osipov, E. Kurenkova, A.V. Ievlev, N.E. Skryabina, D. Fruchart, S. Miraglia, P. de Rango¹NMR study of metal-hydrogen systems for hydrogen storage Journal of Alloys and Compounds 2011 год

Выпускники: бакалавры: Донцов Сергей, Рябчун Филипп, специалисты: Серкин Павел

Чудин Андрей Викторович (Археофизика)

Образование: магистр физики, Физфак СПбГУ

Область научных интересов: дистанционные методы, неразрушающие методы, магнитометрия, археология, ГИС, геофизические методы, керамическое производство.

Преподавательская деятельность: курс «Квантовая магнитометрия», лабораторные работы по магнитному резонансу в поле Земли.

Избранные публикации:

1. Ключевая точка северо-западного Крыма - Статья в сборнике 2013 Вестник РГНФ Пасуманский А.Е., Смекалова Т.Н., Чудин А.В., Кутайсов В. А., Белик Ю. Л.
2. Магнитная съемка новых античных поселений и система сигнализации в северо-западном Крыму - Статья в сборнике, 2012, Издательство "Доля", Симферополь Научное наследие П.Н. Шульца и современные исследования в северо-западном Крыму Смекалова Т.Н., Чудин А.В., Пасуманский А.Е.



Археофизика

малоглубинная геофизика
научные исследования

www.archaeophys.com
archaeophys@gmail.com
(7 812) 943 20 48

Направления исследований

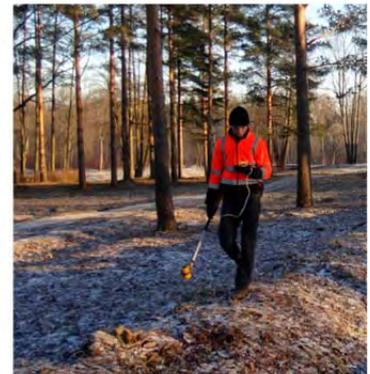
1. Исследование объектов культурного наследия:

- картирование оригинальной планировки парков, усадеб, исторических поселений;
- поиск древних дорог, дренажа и прочих гидросистем;
- поиск и картирование археологических объектов;
- сопровождение археологического обследования при землеотводах для строительства и сельскохозяйственных земляных работ.

2. Обследование инженерных коммуникаций. Поиск и картирование подземных токонесущих кабелей, трубопроводов и т.п.

3. Исследование плодородности земли. Химические анализы почвы.

4. Поиск опасных объектов: неразорвавшихся снарядов, схронов с оружием и др.

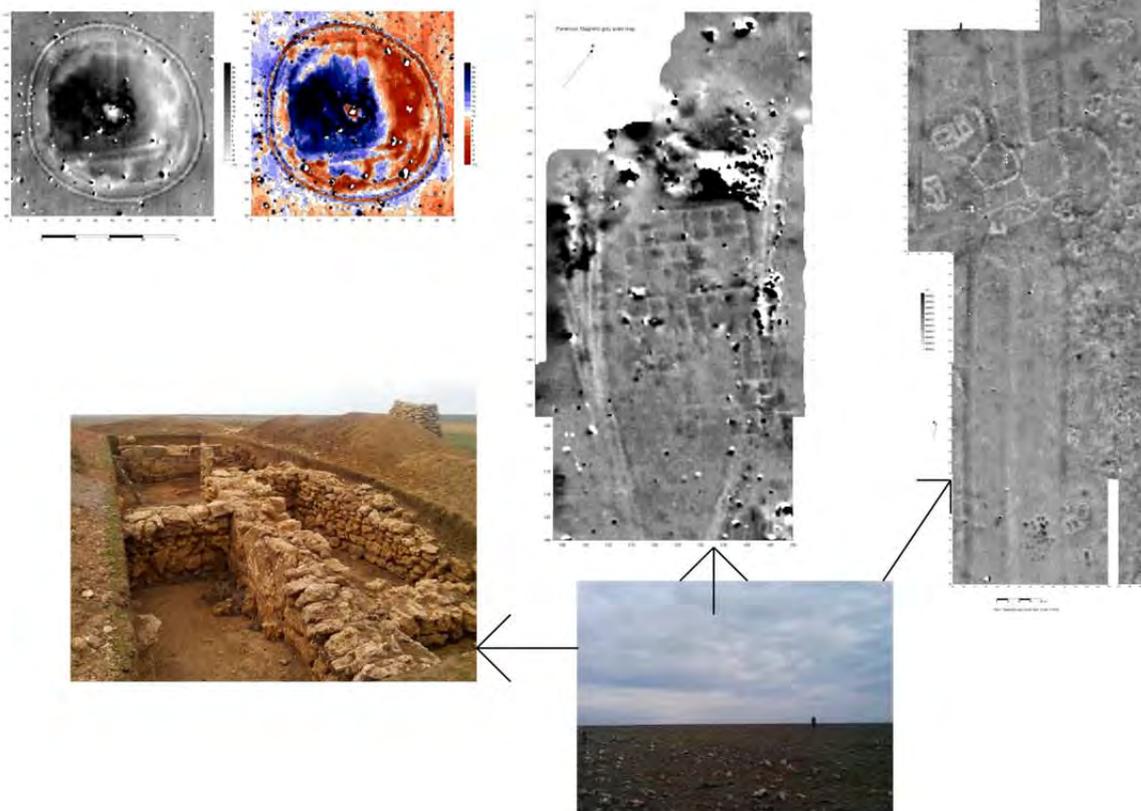


Магнитная съемка на археологических памятниках Тарханкута Статья в сборнике 2010 Издательство "Доля"
Археологические разведки на полуострове Тарханкут Смекалова Т.Н., Чудин А.В., Пасуманский А.Е.

Примеры наших объектов:

Курганы

Поселения



Керамические обжигательные печи



ЛАБОРАТОРИЯ БИМОЛЕКУЛЯРНОГО ЯМР САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

РУКОВОДИТЕЛЬ ЛАБОРАТОРИИ

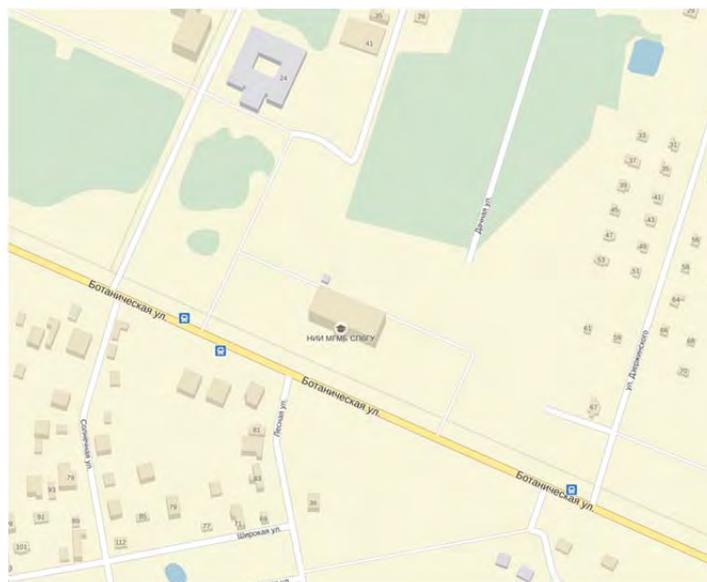
Н.Р. Скрынников (nikolai@purdue.edu)

КОНТАКТНЫЕ ДАННЫЕ

198504, Санкт-Петербург, Старый Петергоф, ул. Ботаническая, д. 17

Телефоны: +7 (812) 428-48-30, +7 (812) 428-48-31

<http://bio-nmr.spbu.ru/ru/>

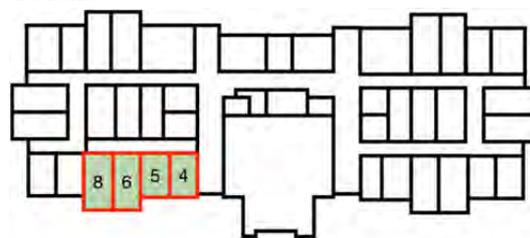


Расположение комнат на этаже:

1 этаж:



4 этаж:



Лаборатория создана в конце 2013 г. Направление работ – исследование структуры и динамики белков методами ЯМР и молекулярной динамики (МД). Лаборатория полностью оснащена оборудованием для приготовления рекомбинантных белков и располагает высокопроизводительными компьютерами с GPU вычислителями для расчётов МД. ЯМР эксперименты проводятся на спектрометрах РЦ «Магнитно-резонансные методы исследования» Научного парка СПбГУ.



Сотрудники лаборатории перед входом в корпус Молекулярной генетики и молекулярной биологии СПбГУ, где расположена лаборатория.

Observing the overall rocking motion of a protein in a crystal

Ma, PX; Xue, Y; Coquelle, N; Haller, JD; Yuwen, TR; Ayala, I; Mikhailovskii, O; Willbold, D; Colletier, JP; Skrynnikov, NR; Schanda, P

NATURE COMMUNICATIONS Volume: 6 Article Number: 8361 Published: 2015

Comment on "The ligand polyhedral model approach to the mechanism of complete carbonyl exchange in [Rh-4(CO)(12)] and [Rh-6(CO)(16)]" by Brian F. G. Johnson, Dalton Transactions, 2015, 44

Heaton, BT; Grachova, EV; Tunik, SP; Podkorytov, IS

DALTON TRANSACTIONS Volume: 44 Issue: 37 Pages: 16611-16613 Published: 2015

"Hydration Shells" of CH₂ Groups of omega-Amino Acids as Studied by Deuteron NMR Relaxation
Rabdano, SO; Donets, AV; Vovk, MA; Michel, D; Chizhik, VI

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B Volume: 119 Issue: 42 Pages: 13358-13366 Published: 2015

C-13 SPE MAS measurement of ligand concentration in compressible chromatographic beads

Elwinger, F; Dvinskikh, SV; Furo, I

MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY Volume: 53 Issue: 8 Pages: 572-577 Published: 2015



ЛАБОРАТОРИЯ «СПЕКТРОСКОПИЯ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА»



Центра коллективного пользования
«Физико-химические методы исследования нитросоединений, координационных, биологически-
активных веществ и наноструктурированных материалов»
при факультете химии Российского государственного
педагогического университета им. А. И. Герцена

СОТРУДНИКИ ЛАБОРАТОРИИ

Директор Центра коллективного пользования
Заслуженный деятель науки РФ,
д.х.н., профессор
БЕРЕСТОВИЦКАЯ ВАЛЕНТИНА МИХАЙЛОВНА



Зам. директора ЦКП
д.х.н., доцент
МАКАРЕНКО СЕРГЕЙ ВАЛЕНТИНОВИЧ

Ведущий специалист
к.х.н., ст. научн. сотрудник
БАЙЧУРИН РУСЛАН ИЗМАИЛОВИЧ



Инженер-исследователь
к.х.н., ст. научн. сотрудник
АВОСКАЛОВА НАТАЛИЯ ИВАНОВНА

КОНТАКТЫ:

191186, Санкт-Петербург,
наб. р. Мойки, д. 48, корпус 13 (лаборатория 124)
Тел. (812) 571-38-00
kohrgpu@yandex.ru, organic@herzen.spb.ru
www.kohrgpu.ru/html/ckp.html

ОБОРУДОВАНИЕ ЛАБОРАТОРИИ

ЯМР-спектрометр Jeol ECX400A

рабочая частота – 400 МГц,
ядра ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{31}P , ^{19}F , ^{29}Si и другие,
5 мм датчик прямого наблюдения
повышенной чувствительности (Royal Probe),
5 мм датчик прямого наблюдения,
5 мм инверсный датчик,
10 мм датчик прямого наблюдения



ВЫПОЛНЯЕМЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Изучение строения различных объектов органической, элементоорганической и неорганической химии в растворе, включая работы по определению состава многокомпонентных смесей.

Использование современных одно- и двумерных гомо- и гетероядерных экспериментов (DEPT, COSY, HETCOR, DOSY и др.) для установления строения изучаемых образцов.

Изучение кинетики химических реакций.

КОЛЛАБОРАЦИИ

В России

Санкт-Петербургский государственный университет

Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)

Санкт-Петербургский университет промышленных технологий и дизайна

Военно-медицинская академия имени С.М. Кирова, Санкт-Петербург

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань

За рубежом

Кокшетауский государственный университет им. Ш. Уалиханова, Республика Казахстан

НЕКОТОРЫЕ ПУБЛИКАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОБОРУДОВАНИЯ ЛАБОРАТОРИИ

Berestovitskaya V.M., Efremova I.E., Lapshina L.V., Serebryannikova A.V., Gurzhiy V.V., Abzianidze V.V. Synthesis of 3-aryl-6a-methyl-6-nitro-1-phenylhexahydrothieno[2,3-d]pyrazole 4,4-dioxides // *Mendeleev Communications*. 2015. Vol. 25. N 3. P. 191-192.

Байчурин Р.И., Берестовицкая Д.Б., Байчурина Л.В., Абоскалова Н.И., Берестовицкая В.М. Изучение геометрической изомерии этил-β-арил(гетарил)-α-нитроакрилатов методом спектроскопии ЯМР ^1H // *ЖОХ*. 2016. Т. 86. Вып. 1. С. 56-62.

Berestovitskaya V.M., Baichurin R.I., Aboskalova N.I., Gurzhiy V.V. New approaches to the synthesis of 2,5-dihydro-1,5-benzothiazepines containing nitro groups // *Mendeleev Communications*. 2014. Vol. 24. N 6. P. 380-382.

Makarenko S.V., Stukan' E.V., Lyssenko K.A., Anan'ev I.V., Berestovitskaya V.M. 2-Nitromethyl-2-trichloromethyl-1,3-benzodioxoles and 2-nitromethyl-2-trichloromethyl-1,3-benzoxazolines: Synthesis and structure // *Rus. Chem. Bull*. 2013. Vol. 62. N 6. P. 1377-1381.

Baichurin R.I., Aboskalova N.I., Trukhin E.V., Berestovitskaya V.M. Aryl(hetaryl)-containing gem-cyanonitroethenes: Synthesis, structure, and reactions with 2,3-dimethyl-1,3-butadiene // *Rus. J. Gen. Chem*. 2015. Vol. 85. N 8. P. 1845-1854.

Катленок Е.А., Золотарев А.А., Иванов А.Ю., Смирнов С.Н., Байчурин Р.И., Балашев К.П. Строение, оптические и электрохимические свойства биядерных платинированных комплексов 2-фенилбензотиазола с мостиковыми 2-меркаптопроизводными тиазолина, 1-метилимидазола и пиримидина // *Координационная химия*. 2015. Т. 41. № 6. С. 357-364.

Лаборатория Биомолекулярной ЯМР Спектроскопии

*Института Биоорганической Химии им. академиков М.М.
Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН*



НАШИ ВОЗМОЖНОСТИ

Лаборатория биомолекулярной ЯМР спектроскопии ИБХ РАН, является крупнейшим научным центром России в области исследования пространственных структур и подвижности белков (в том числе мембранных) и пептидов методами ЯМР спектроскопии высокого разрешения. В лаборатории также ведутся работы по белковой инженерии: разрабатываются и применяются наиболее передовые методы получения рекомбинантных белков, тотально или селективно меченых стабильными изотопами ^2H , ^{13}C , ^{15}N . Еще одной областью научных интересов лаборатории является определение химических структур низкомолекулярных соединений, в том числе со сверхмалых количеств (от 200 мкг). Оборудование лаборатории включает, в том числе, три высокопольных ЯМР спектрометра (800, 700, 600 МГц), оснащенных сверхчувствительными криогенными датчиками тройного резонанса.

НАШИ КОНТАКТЫ

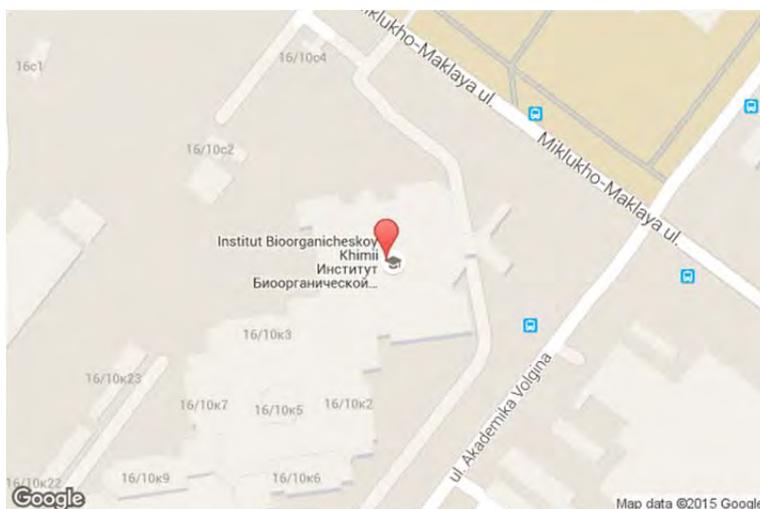
www.ibch.ru/structure/groups/nmr

+7 495 330-74-83

+7 495 330-59-29

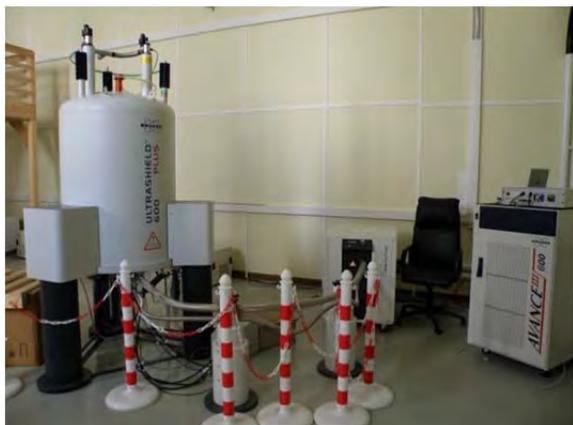
aars@nmr.ru

117997, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 16/10



НАШЕ ОБОРУДОВАНИЕ

Bruker Avance III 600 MHz



Датчики:

- Криодатчик тройного резонанса CP-TXI (^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^2H), чувствительность 6000 по ^1H , 300 по ^{13}C
- Теплый датчик тройного резонанса TXI (^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^2H), чувствительность 1200 по ^1H .
- Двухканальный широкополосный датчик ($^1\text{H}/^{19}\text{F}$, BB); H/F switch

Применимость:

Структурные исследования небольших белков (до 30-40 кДа), структуры низкомолекулярных соединений, фосфорный ЯМР.

Bruker Avance 700 MHz



Датчики:

- Теплый датчик тройного резонанса (^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^2H), чувствительность 1700 по ^1H .

Применимость:

Структурные исследования небольших белков (до 30-40 кДа), структуры низкомолекулярных соединений.

Bruker Avance III 800 MHz



Датчики:

- Инверсный криодатчик тройного резонанса CP-TCS (^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^2H), чувствительность 8000 по ^1H , 1500 по ^{13}C .
- Теплый датчик тройного резонанса TXI (^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^2H), чувствительность 2200 по ^1H ,
- Трехканальный датчик твердого тела CP-MAS (вращение до 20 кГц)

Применимость:

Структурные исследования небольших и больших белков (до 100 кДа), структуры низкомолекулярных соединений, прямая детекция гетероядер, исследования неупорядоченных белков, ЯМР твердого тела биомакромолекул.

Помимо ЯМР-спектрометров в лаборатории имеются приборы для измерения динамического светорассеяния (DynaPro), HPLC и FPLC хроматографы, качалки, ферментер, спектрофотометры, оборудование для сушки (SpeedVac, лиофильная сушиллка), ультрацентрифуга, кластеры и многоядерные компьютеры для расчетов.



КОЛЛАБОРАЦИИ

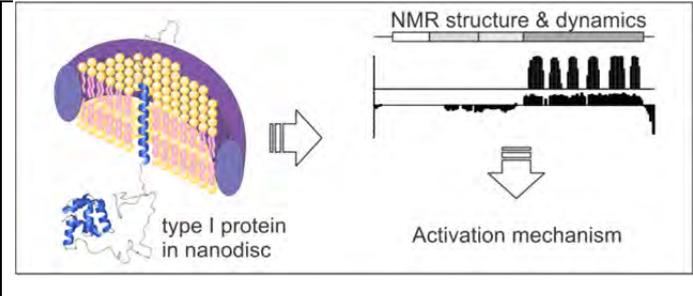
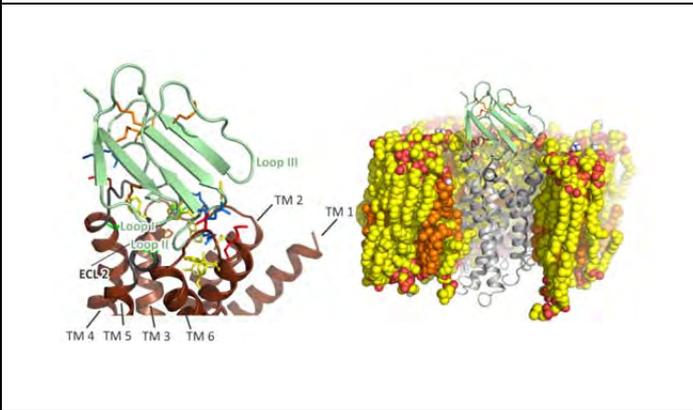
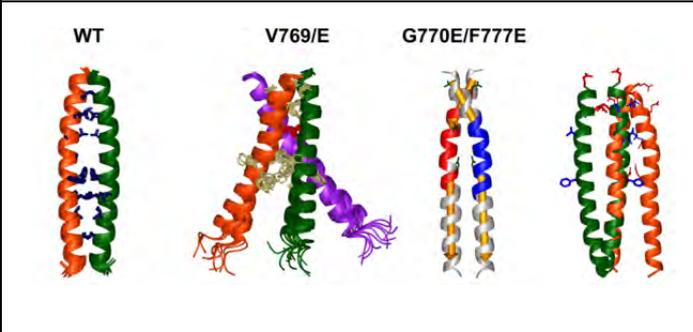
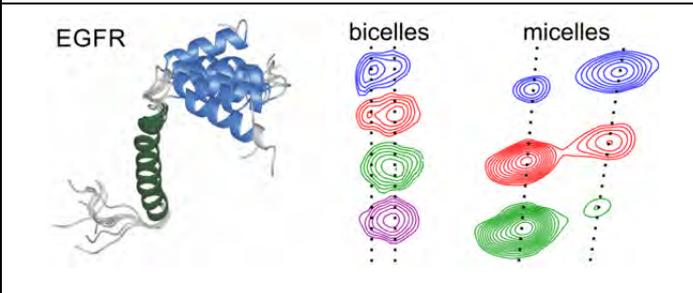
В России:

- Отдел биоинженерии ИБХ РАН
- Лаборатория моделирования биомолекулярных систем ИБХ РАН
- Учебно-научный центр ИБХ РАН
- Отдел молекулярной нейробиологии ИБХ РАН
- Группа синтеза природных соединений ИБХ РАН
- Лаборатория химии липидов ИБХ РАН
- Кафедра биоинженерии Биологического факультета МГУ
- Институт биофизики СО РАН (Красноярск)
- МФТИ (Долгопрудный)
- Уральский Федеральный университет (Екатеринбург)

В мире:

- Paul Scherrer Instituut (Villigen, Швейцария)
- Freie Universitaat Berlin (Берлин, Германия)
- Instituto de Salud Carlos III (Мадрид, Испания)
- Harvard School of Medicine (Бостон, США)
- Johns Hopkins University (Балтимор, США)
- University of Gothenburg (Гётеборг, Швеция)
- University of Arizona (Туксон, США)

КЛЮЧЕВЫЕ ПУБЛИКАЦИИ 2014-2015

 <p>type I protein in nanodisc</p> <p>NMR structure & dynamics</p> <p>Activation mechanism</p>	<p><u>Mineev KS, Goncharuk SA, Kuzmichev PK, Vilar M, Arseniev AS.</u></p> <p>NMR Dynamics of Transmembrane and Intracellular Domains of p75NTR in Lipid-Protein Nanodiscs.</p> <p>Biophys J. 2015; 109(4):772-82.</p>
 <p>Loop III</p> <p>Loop II</p> <p>Loop I</p> <p>ECL2</p> <p>TM 4</p> <p>TM 5</p> <p>TM 3</p> <p>TM 6</p> <p>TM 1</p> <p>TM 2</p>	<p><u>Lyukmanova EN, Shenkarev ZO, Shulepko MA, Paramonov AS, Chugunov AO, Janickova H, Dolejsi E, Dolezal V, Utkin YN, Tsetlin VI, Arseniev AS, Efremov RG, Dolgikh DA, Kirpichnikov MP.</u></p> <p>Structural Insight into Specificity of Interactions between Nonconventional Three-finger Weak Toxin from <i>Naja kaouthia</i> (WTX) and Muscarinic Acetylcholine Receptors.</p> <p>J Biol Chem. 2015; 290(39):23616-30.</p>
 <p>Angewandte Chemie International Edition</p> <p>2015-54/28</p> <p>WILEY-VCH</p>	<p><u>Purtov KV, Petushkov VN, Baranov MS, Mineev KS, Rodionova NS, Kaskova ZM, Tsarkova AS, Petunin AI, Bondar VS, Rodicheva EK, Medvedeva SE, Oba Y, Oba Y, Arseniev AS, Lukyanov S, Gitelson JI, Yampolsky IV.</u></p> <p>The Chemical Basis of Fungal Bioluminescence.</p> <p>Angew Chem Int Ed Engl. 2015;54(28):8124-8.</p>
 <p>WT</p> <p>V769/E</p> <p>G770E/F777E</p>	<p><u>Manni S, Mineev KS, Usmanova D, Lyukmanova EN, Shulepko MA, Kirpichnikov MP, Winter J, Matkovic M, Deupi X, Arseniev AS, Ballmer-Hofer K.</u></p> <p>Structural and functional characterization of alternative transmembrane domain conformations in VEGF receptor 2 activation.</p> <p>Structure. 2014; 22(8):1077-89.</p>
 <p>EGFR</p> <p>bicelles</p> <p>micelles</p>	<p><u>Mineev KS, Panova SV, Bocharova OV, Bocharov EV, Arseniev AS.</u></p> <p>The Membrane Mimetic Affects the Spatial Structure and Mobility of EGFR Transmembrane and Juxtamembrane Domains.</p> <p>Biochemistry. 2015; 54(41): 6295-6298</p>

	<p>Berkut AA, Peigneur S, <u>Myshkin MY</u>, <u>Paramonov AS</u>, Lyukmanova EN, <u>Arseniev AS</u>, Grishin EV, Tytgat J, Shenkarev ZO, Vassilevski AA.</p> <p>Structure of membrane-active toxin from crab spider <i>Heriades melloteei</i> suggests parallel evolution of sodium channel gating modifiers in Araneomorphae and Mygalomorphae.</p> <p>J Biol Chem. 2015;290(1):492-504.</p>
	<p><u>Mineev KS</u>, <u>Lesovoy DM</u>, <u>Usmanova DR</u>, <u>Goncharuk SA</u>, Shulepko MA, Lyukmanova EN, Kirpichnikov MP, <u>Bocharov EV</u>, <u>Arseniev AS</u>.</p> <p>NMR-based approach to measure the free energy of transmembrane helix-helix interactions.</p> <p>Biochim Biophys Acta. 2014 ;1838(1 Pt B):164-72.</p>
	<p>Petushkov VN, <u>Dubinyi MA</u>, Tsarkova AS, Rodionova NS, Baranov MS, Kublitski VS, Shimomura O, Yampolsky IV.</p> <p>A novel type of luciferin from the Siberian luminous earthworm <i>Fridericia heliota</i>: structure elucidation by spectral studies and total synthesis.</p> <p>Angew Chem Int Ed Engl. 2014;53(22):5566-8.</p>
	<p><u>Mineev KS</u>, <u>Goncharuk SA</u>, <u>Arseniev AS</u>.</p> <p>Toll-like receptor 3 transmembrane domain is able to perform various homotypic interactions: an NMR structural study.</p> <p>FEBS Lett. 2014; 588(21):3802-7.</p>
	<p><u>Shenkarev ZO</u>, <u>Gizatullina AK</u>, Finkina EI, Alekseeva EA, Balandin SV, <u>Mineev KS</u>, <u>Arseniev AS</u>, Ovchinnikova TV.</p> <p>Heterologous expression and solution structure of defensin from lentil <i>Lens culinaris</i>.</p> <p>Biochem Biophys Res Commun. 2014 22;451(2):252-7.</p>

КЛЮЧЕВЫЕ СОТРУДНИКИ



Руководитель лаборатории

Александр Сергеевич Арсеньев, д.х.н., профессор

aars@nmr.ru

+7 495 330-59-29



Ведущий научный сотрудник

Захар Шенкарев, д.ф.-м.н.

zh@nmr.ru

Научные интересы: структура ионных каналов, мембраноподобные среды, низкомолекулярные соединения, токсины, защитные и антимикробные пептиды, биофизика фолдинга, ЯМР-релаксация



Старший научный сотрудник

Эдуард Бочаров, к.х.н.

bon@nmr.ru

Научные интересы: структура рецепторных киназ, предшественника β -амилоида, мембраноподобные среды, биофизика фолдинга, защитные и антимикробные пептиды, ЯМР-релаксация



Старший научный сотрудник

Константин Минеев, к.ф.-м.н.

mineev@nmr.ru

Научные интересы: структура мембранных белков I типа, мембраноподобные среды, биофизика фолдинга, токсины, защитные и антимикробные пептиды, низкомолекулярные соединения, ЯМР-релаксация



Старший научный сотрудник

Ольга Бочарова, к.м.н.

obon@nmr.ru

Научные интересы: фолдинг белков, амилоидогенез, прионы млекопитающих, получение и очистка рекомбинантных белков, бесклеточный синтез, изотопное мечение



Научный сотрудник

Александр Парамонов, к.ф.-м.н.

sasha@nmr.ru

Научные интересы: структура ионных каналов, мембраноподобные среды, токсины, защитные и антимикробные пептиды, биофизика фолдинга, ЯМР-релаксация



Научный сотрудник

Сергей Гончарук, к.б.н.

goncharuk@nmr.ru

Научные интересы: технологии получения рекомбинантных белков, бесклеточный синтез, изотопное мечение, мембраноподобные среды



Научный сотрудник

Кирилл Надеждин, к.ф.-м.н.

kirill@nmr.ru

Научные интересы: структура рецепторных киназ, предшественника β -амилоида, мембраноподобные среды, биофизика фолдинга, токсины, защитные и антимикробные пептиды, ЯМР-релаксация



Научный сотрудник

Марина Гончарук, к.б.н.

goncharuk@nmr.ru

Научные интересы: технологии получения рекомбинантных белков, бесклеточный синтез, изотопное мечение



Научный сотрудник

Максим Дубинный, к.ф.-м.н.

maxim@nmr.ru

Научные интересы: структура бактериородопсина, токсинов, защитных и антимикробных пептидов, низкомолекулярных соединений, ЯМР-релаксация



Младший научный сотрудник

Светлана Нольде

sveta@nmr.ru

Научные интересы: ЯМР-релаксация, МД симуляции, силовые поля.



Научный сотрудник

Дмитрий Лесовой, к.ф.-м.н.

dima_l@nmr.ru

Научные интересы: ЯМР-релаксация, фосфорный ЯМР, мембраноподобные среды, структура белков, биофизика фолдинга



Младший научный сотрудник

Павел Кузьмичев

kouzmich@nmr.ru

Научные интересы: технологии получения рекомбинантных белков, бесклеточный синтез, изотопное мечение



Центр магнитной томографии и спектроскопии Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова (ЦМТС МГУ).

ЦМТС МГУ был создан в 1996 году по инициативе академика РАН Р.З. Сагдеева и ректора МГУ академика РАН В.А.Садовниченко. Первым директором-организатором ЦМТС был академик Сагдеев Р.З. С 1998 по 2010 г. ЦМТС МГУ возглавлял проф. Пирогов Ю.А. С момента создания ЦМТС работал, как Учебно-научный межфакультетский и междисциплинарный Центр МГУ, а с 2010 года вошел в состав факультета фундаментальной медицины Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» в ранге научно-исследовательской лаборатории магнитной томографии и спектроскопии. ЦМТС МГУ является зарегистрированным центром коллективного пользования «Биоспектротомография» (<http://ckp-rf.ru/ckp/352678>). Оборудование ЦМТС МГУ включено в реестр уникальных научных установок РФ (<http://ckp-rf.ru/usu/352741>).

ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ ЦМТС МГУ:

1. Исследования структуры, изотопного состава и превращений органических, элементоорганических и супрамолекулярных соединений, включая метаболиты и физиологически активные соединения.
2. Определение структуры и динамических свойств в растворе биомолекул, включая фармакологически важные пептиды, глобулярные белки и нуклеиновые кислоты.
3. Изучение белок-лигандных взаимодействий. ЯМР-скрининг физиологически активных соединений.
4. Исследования в области магнитно-резонансной томографии и *in vivo* спектроскопии ЯМР.
5. Изучение гетерогенных каталитических процессов *in situ* методами ЯМР твердого тела с вращением образца под магическим углом.

КАК НАС НАЙТИ:



Адрес ЦМТС МГУ:

Ленинские горы, д. 1, стр. 73,

Москва, ГСП-1,

119991



ШТАТНЫЕ СОТРУДНИКИ ЦМТС МГУ



Хохлов Алексей Ремович

Заведующий лабораторией, академик РАН, профессор

Тел.: +7 495 9395340

Область научных интересов: физика полимеров и кристаллов, биофизика, медицинская физика, биохимия, магнитно-резонансная томография, спектроскопия ЯМР



Польшаков Владимир Иванович

Зам. зав лабораторией, рук. направления спектральных исследований, д.х.н.

e-mail: vpolsha@gmail.com

Тел.: +7 495 9394485

Область научных интересов: спектроскопия ЯМР физиологически активных соединений, спектроскопия ЯМР белков, структура и динамика белков, белок-лигандные взаимодействия, молекулярная фармакология



Пирогов Юрий Андреевич

Рук. направления томографических исследований, д. ф.-м. н., профессор

e-mail: yupi937@gmail.com

Тел.: +7 495 9394882

Область научных интересов: радиофизика, медицинская физика, биоспектротомография, *in vivo* томография и спектроскопия



Анисимов Николай Викторович

Старший научный сотрудник, д. ф.-м. н.

e-mail: anisimovnv@mail.ru

Тел.: +7 495 9394820

Область научных интересов: магнитно-резонансная томография, ЯМР спектроскопия, радиофизика, *in vivo* спектроскопия ЯМР



Гуляев Михаил Владимирович

Научный сотрудник, к. ф.-м. н.

e-mail: mihon-epsilon@ya.ru

Тел.: +7 495 9394882

Область научных интересов: магнитно-резонансная томография, медицинская физика, биофизика, *in vivo* спектроскопия ЯМР



Манцызов Алексей Борисович

Научный сотрудник, к. х. н.

e-mail: mantsab@gmail.com

Тел.: +7 495 9394882

Область научных интересов: ЯМР спектроскопия физиологически активных соединений, структура и динамика биомакромолекул, рецептор-лигандные взаимодействия, молекулярное моделирование



Павлова Ольга Сергеевна

Инженер-лаборант

e-mail: ofleu@p@mail.ru

Тел.: +7 495 9394882

Область научных интересов: магнитно-резонансная томография, медицинская физика, биофизика, *in vivo* спектроскопия ЯМР

Савельев Олег Юрьевич

Инженер-лаборант

e-mail: oleg@cmts.cmm.msu.ru

Тел.: +7 495 9394485

Область научных интересов: спектроскопия ЯМР органических соединений, ЯМР-метабономика

СОТРУДНИКИ ХИМИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МГУ, ПРОВОДЯЩИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОБОРУДОВАНИЯ ЦМТС



Устынюк Юрий Александрович

Профессор, д.х.н.

e-mail: ustynyuk@nmr.chem.msu.ru

Тел.: +7(495) 939-26-77

Область научных интересов: спектроскопия ЯМР органических соединений, металлоорганическая и координационная химия, физическая органическая химия, спектроскопия, катализ, проблемы химического образования



Колягин Юрий Геннадьевич

Старший научный сотрудник, к.х.н.

e-mail: kolyagin@mail.ru

Тел.: +7(495) 939-20-54

Область научных интересов: спектроскопия ЯМР твердого тела, гетерогенные каталитические процессы



Чертков Вячеслав Алексеевич

Старший научный сотрудник, д.х.н.

e-mail: vchertkov@hotmail.com

Тел.: +7 (495) 939-53-78

Область научных интересов: спектроскопия ЯМР органических соединений, конформационный анализ, изотопные эффекты, высокого разрешения, расшифровка мультиплетной структуры спектров ЯМР



Нечаев Михаил Сергеевич

Ведущий научный сотрудник, д.х.н.

e-mail: m.s.nechaev@org.chem.msu.ru

Тел.: +7(495) 939-26-77

Область научных интересов: спектроскопия ЯМР органических соединений, металлоорганическая химия, гомогенный катализ, стабильные карбены, органическая электроника



Будынина Екатерина Михайловна

Ведущий научный сотрудник, к.х.н.

e-mail: ekatbud@kinet.chem.msu.ru

Тел.: +7(495) 939-13-16

Область научных интересов: спектроскопия ЯМР органических соединений



Рознятовский Виталий Александрович

Старший научный сотрудник, к.х.н.

e-mail: Vit.Rozn@nmr.chem.msu.ru

Тел.: +7(495) 939-36-00

Область научных интересов: спектроскопия ЯМР и ее применения в физической, органической и элементоорганической химии.

Количественный и изотопный анализ. Строение органических и элементоорганических соединений.

ОБОРУДОВАНИЕ ЦМТС МГУ



Спектрометр ЯМР Bruker Avance 600 MHz для измерения спектров ЯМР жидкостей.

Спектрометр имеет три радиочастотных канала и оборудован несколькими датчиками, включая трехканальный TXI для гетероядерных экспериментов $^1\text{H}/^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$.

Прибор оборудован набором датчиков:

- DUL - два частотных канала: ^1H и ^{13}C ; чувствительность (S/N) 420:1 для ^1H , 300:1 для ^{13}C .
- VBI - инверсный, два канала: ^1H и широкополосный, перестраиваемый на разные ядра в диапазоне примерно от 242.9 (31P) до 27.9 (109Ag) МГц; чувствительность 1000:1 для ^1H .
- PAXI – инверсный, три канала: ^1H , ^{13}C , ^{15}N ; автоматическая настройка резонанса; чувствительность 1200:1 для ^1H .



Спектрометр ЯМР Bruker Avance-II 400WB с полем 9,4Тс и магнитом, имеющим широкий диаметр для измерения спектров ЯМР твердых образцов.

Спектрометр имеет три радиочастотных канала ($^1\text{H}/\text{X}/\text{Y}$) с усилителями на 1кВт, температурный регулятор (BVT 3000+ BVTB 3500), градиентный модуль (GREAT 1/10), система вращения MAS-II.

Прибор оборудован набором датчиков:

1. Твердотельные с системой ВМУ (MAS):

- Датчик 7 мм, двухканальный ($^1\text{H}/^{31}\text{P}-^{15}\text{N}$) с расширенным температурным диапазоном WVT (от -50 до $+350^\circ\text{C}$).
- Датчик 4 мм, двухканальный ($^1\text{H}-^{19}\text{F}/^{31}\text{P}-^{15}\text{N}$) с расширенным температурным диапазоном WVT (от -50 до $+350^\circ\text{C}$).
- Датчик 4 мм, трёхканальный ($^1\text{H}/^{31}\text{P}-^{15}\text{N}/^{65}\text{Cu}-^{15}\text{N}$) с температурным диапазоном DVT (от -150 до $+120^\circ\text{C}$).
- Датчик 4mm трёхканальный градиентный с дейтериевым локом $^1\text{H}/^2\text{H}/^{13}\text{C}/^{31}\text{P}/\text{Gz}$, HRMAS SB для биохимических исследований.

2. Жидкостные датчики:

- BBO 5mm 400W1.
- SEX 5mm дейтериевый со фторным локом, $^2\text{H}(\text{obs})/^1\text{H}(\text{dec})/^19\text{F}(\text{lock})$.

Биоспектротограф Bruker BioSpec 70/30 USR с диаметром теплового отверстия 30 см магнитным полем 7 Тл (300 МГц на ядрах ^1H) для томографических исследований экспериментальных животных и измерения *in vivo* спектров ЯМР на ядрах ^1H , ^{13}C , ^{31}P , ^{19}F .



Прибор оборудован градиентной системой BGA20S2 (100 мТ/м), питание которой осуществляется с помощью блока Xantrex XPR 150-40 Mod. Биоспектротограф оснащен процессором AQS Chassis Multi-Rx, шиммирующими катушками TOSI BS30 и блоком питания BSPS12802. Управление прибором осуществляется с помощью программ TopSpin 2.0 и ParaVision 5.0.

Биоспектротограф имеет специализированный набор катушек:



- Одноканальная (^1H) объемная приемно-передающая катушка с внутренним диаметром – 154 мм, предназначенная для исследования крупных лабораторных животных (кроликов, крыс). Может также использоваться в качестве передающей при исследовании отдельных частей тела крыс, мышей.
- Двухканальная (^1H , ^{19}F) объемная приемно-передающая катушка с внутренним диаметром – 72 мм, предназначенная для исследования тела крыс, мышей. Может также использоваться в качестве передающей при исследовании отдельных частей тела крыс, мышей.
- Одноканальная (^1H) поверхностная приемная катушка, предназначенная для исследования головного мозга крыс, тела мышей.
- Одноканальная (^1H) поверхностная приемная катушка, предназначенная для исследования головного мозга мышей.
- Двухканальная (^1H , ^{13}C) поверхностная приемно-передающая катушка, предназначенная для исследования частей тела крыс, мышей, а также образцов, содержащих ядра ^{13}C .
- Двухканальная (^1H , ^{31}P) поверхностная приемно-передающая катушка, предназначенная для исследования частей тела крыс, мышей, а также образцов, содержащих ядра ^{31}P .
- Одноканальная (^2H) поверхностная приемно-передающая катушка, предназначенная для исследования объектов, содержащих ядра дейтерия ^2H .



Установка для газовой анестезии лабораторных животных.



Базовое лабораторное оборудование, включающее холодовую комнату (+4°), препаративный FPLC хроматограф BioRad BioLogic LP, УФ спектрофотометр Varian Cary 50, лиофильную сушку Labconco, низкотемпературные морозильники, аналитические весы, рН метры, центрифуги, системы водоподготовки и т.п.



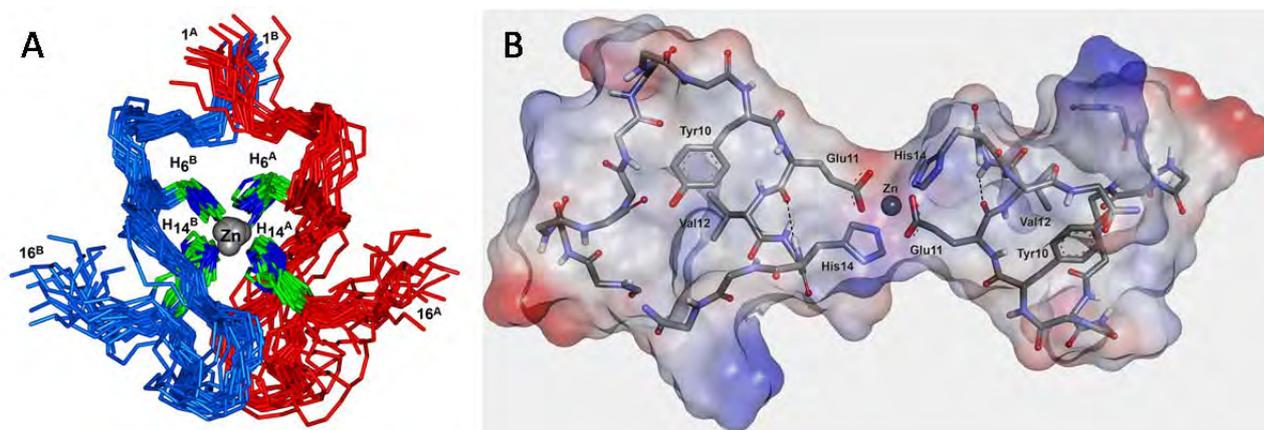
Серверы, дисковые RAID-массивы, рабочие станции с программным обеспечением для обработки многомерных спектров ЯМР, расчетов белковых структур, квантово-химических расчетов, визуализации МРТ изображений и т.п. Доступ к суперкомпьютерам МГУ Ломоносов-1 и Ломоносов-2.

ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ ЦМТС МГУ И ДОСТИЖЕНИЯ ПОСЛЕДНИХ ЛЕТ

Исследования структуры и функции белков

В ЦМТС МГУ проводятся исследования структуры, динамических свойств и функций биомолекул с помощью спектроскопии ЯМР в растворе. В фокусе интересов – фармакологически важные белки (фрагменты теломеразы, метионин гамма-лиаза, эукариотический фактор терминации трансляции, инсулин и т.п.), пептиды и нуклеиновые кислоты. Изучаемые объекты имеют молекулярную массу от нескольких кДа (для небольших фрагментов бета-амилоида [11,15]) до ~50 кДа (для фактора терминации трансляции eRF1 человека [9]). В банк белковых структур PDB (www.rcsb.org) депонировано 10 структур белков, определенных в ЦМТС МГУ методом ЯМР.

Так, например, с целью установления молекулярного механизма возникновения и развития болезни Альцгеймера, а также поиска потенциальных мишеней, контролирующих это заболевание, методом ЯМР исследуется взаимодействие металлсвязывающего домена бета-амилоида $A\beta$ с ионами цинка. Определена структура в растворе цинк-индуцированных димеров пептида $A\beta_{1-16}$ крысы (не имеющей заболевания, подобного болезни Альцгеймера) и изоформы пептида H6R- $A\beta_{1-16}$ человека - продукта т.н. английской патологической мутации H6R. На основании данных ЯМР совместно с результатами, полученными с помощью методов изотермической калориметрии, поверхностного плазмонного резонанса и молекулярного моделирования, был предложен механизм цинк-зависимой олигомеризации $A\beta$ человека [15].



Структура цинк-связанных димеров пептида $A\beta_{1-16}$ крысы (А, код PDB 2LI9) и H6R- $A\beta_{1-16}$ человека (В, код PDB 2MGT).

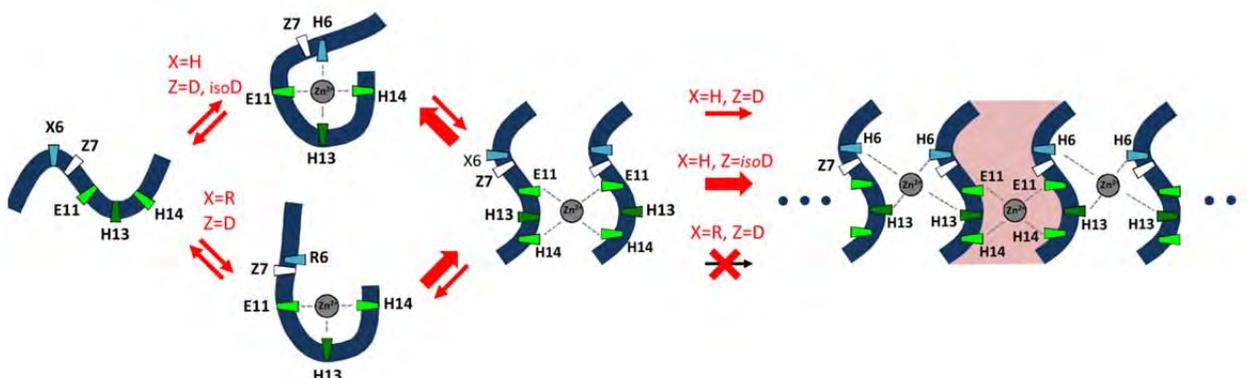
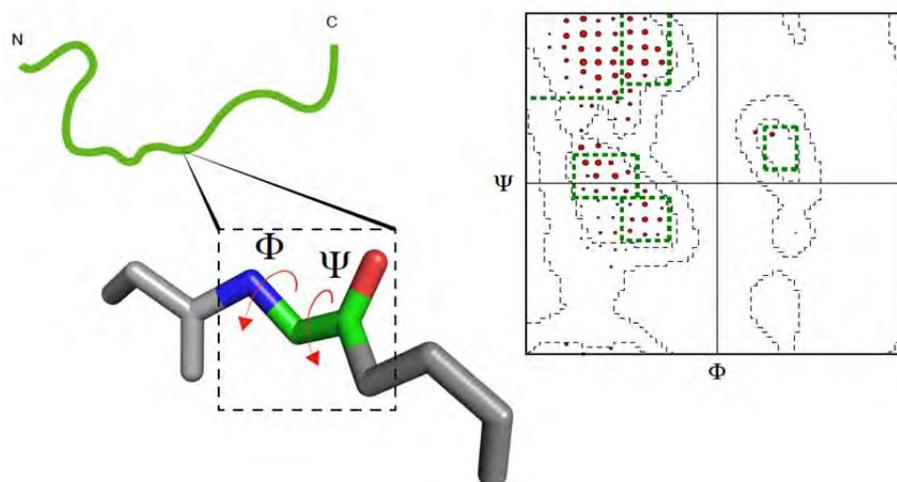
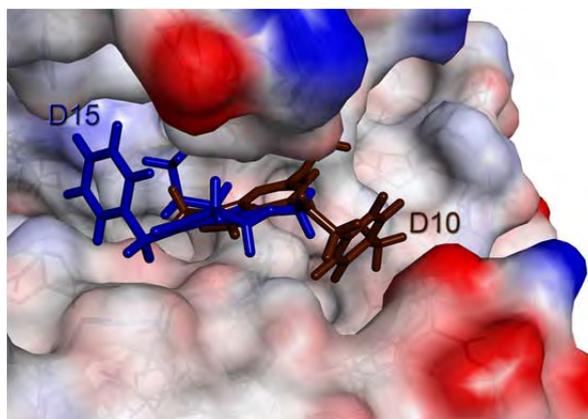


Схема цинк-индуцированной олигомеризации металлсвязывающего домена различных изоформ $A\beta$ человека [15].
Цинк-связанные димеры являются зародышами олигомеризации бета-амилоидного пептида.

В сотрудничестве с лабораторией профессора Э. Бакса (NIH/NIDDK) был разработан новый метод определения равновесных населенностей конформаций основной белковой цепи неструктурированных полипептидов и подвижных петель структурированных белков [13]. Метод использует набор измеряемых пространственных ограничений на углы Φ и Ψ (на основе констант спин-спинового взаимодействия, ЯЭО и химических сдвигов) и позволяет определить веса различных конформаций путем подгонки расчетных величин пространственных ограничений к экспериментальным. Разработанный метод реализован в виде программы MERA (Maximum Entropy Ramachandran map Analysis from NMR data), доступной как web-сервер и самостоятельное приложение.



Проводятся исследования по поиску потенциальных антибактериальных препаратов – ингибиторов метионин гамма-лиазы с использованием методик ЯМР-скрининга. Адаптированы и отлажены методики ЯМР-скрининга, включая STD (saturation transfer difference), Water-LOGSY, INFARMA и SAR-by-ILOE. Найдены соединения-лидеры, сравнимые по ингибирующим свойствам с лучшими ранее известными ингибиторами метионин гамма-лиазы [7].



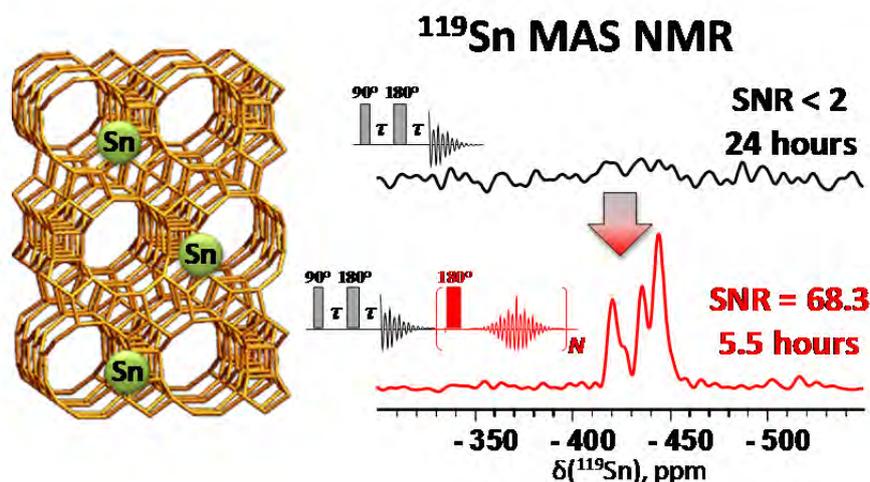
В сотрудничестве Центром ЯМР института биомедицинских наук Тайваня (Institute of Biomedical Sciences, Academia Sinica) методами многомерной гетероядерной спектроскопии ЯМР исследован фактор терминации трансляции eRF1 человека (437 аминокислотных остатков, ~50 кДа) [9]. Получено отнесение сигналов большинства аминокислотных остатков белка, что позволило получить информацию о строении полноразмерного белка, структура отдельных доменов которого была ранее определена методом ЯМР (коды PDB 2LLX, 2HST, 2KTV, 2KTU).

Исследования по направлению твердотельного ЯМР

Основные исследования ЯМР твёрдого тела связаны с изучением гетерогенных каталитических процессов, и в частности, структуры и свойств твёрдых катализаторов. Основной акцент работы направлен на разработку новых спектральных методик и подходов *in situ* с использованием системы ВМУ (MAS). Работы выполняются в тесном сотрудничестве с лабораторией кинетики и катализа Химического факультета МГУ (проф. Иванова И.И.). За время существования ЯМР центра получено огромное количество новой научной информации и разработано целый ряд подходов в использовании ЯМР в данной области химии. Научной группой ведутся совместные работы с группой Аго Самосона (Таллинн, Эстония) по разработке проточного ВМУ ЯМР датчика для исследования гетерогенных каталитических процессов. Ведётся разработка новых ВМУ-ячеек для исследования различных химических процессов спектроскопией ЯМР в режиме *in situ*.



В 2011-13 году Колягиным Ю.Г. была разработана и запатентована специальная автоклавная ВМУ ячейка, предназначенная для исследования методом ЯМР ВМУ химических процессов протекающих при повышенных температурах и давлениях [1]. Её использование позволило впервые наблюдать гидротермальный синтез цеолитных материалов типов MFI, BEA, AlPO-11, -18, SAPO-18 спектроскопии ВМУ ЯМР в режиме *in situ*. Получаемая в этих экспериментах уникальная научная информация позволяет напрямую установить основные стадии процессов, состав и структуру промежуточных соединений, кинетику их формирования и превращения.

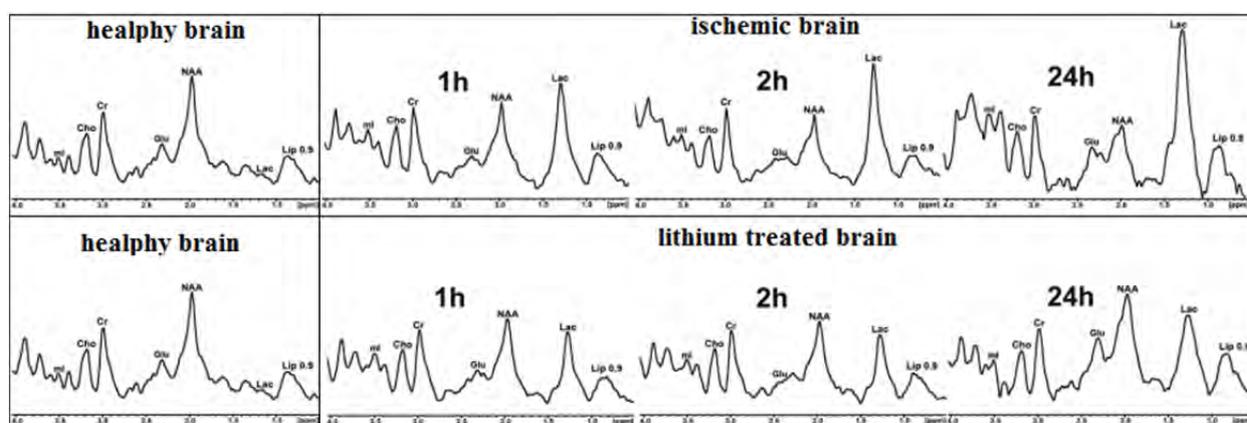


Группой активно разрабатываются и адаптируются новые спектральные методики, используемые для характеристики каталитических материалов. Например, в 2015 году адаптация методики CPMG/MAS с условиями пробоподготовки оловосодержащих цеолитных катализаторов привела к росту чувствительности спектроскопии ЯМР ВМУ на ядрах ^{119}Sn в более чем 40 раз [2]. Эта методика фактически убрала «бутылочное горло» в разработке и исследовании этих катализаторов, так как ранее определение

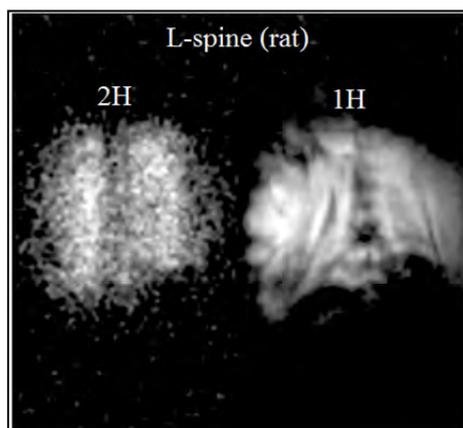
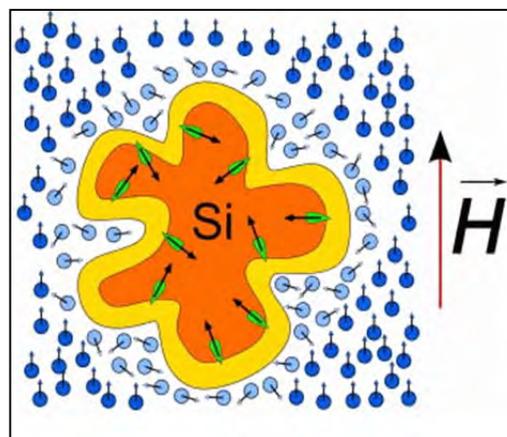
молекулярного состояния оловянных центров в них было возможно только с использованием дорогостоящего изотопного обогащения.

Исследования по направлению магнитно-резонансной томографии

С помощью биоспектротомографа глубоко исследованы процессы образования и методы лечения локальной ишемии головного мозга крыс. В частности, с помощью локальной ^1H -ЯМР-спектроскопии было проведено измерение доступных метаболитов – маркеров митохондриальной дисфункции в головном мозге крыс. В сравнении со здоровым мозгом было выявлено значительное увеличение лактата и миоинозитола, а также наблюдалось умеренное снижение N-ацетиласпартата через 24 ч после реперфузии. Примечательно, что введение хлорида лития в фазе сразу после индукции реперфузии нормализовывало уровни метаболитов. Кроме того, терапия солями лития (хлорида или сукцината), приводила к снижению объема повреждения и отека головного мозга, а также восстановлению сенсомоторных функций головного мозга.



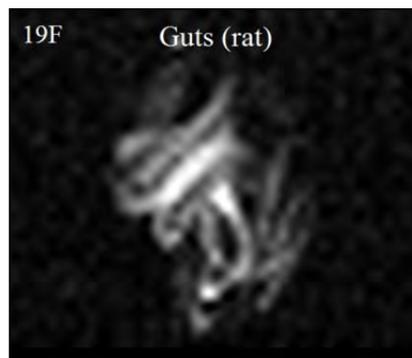
Другое направление исследований – апробация новых контрастных агентов для МРТ. В качестве потенциальных контрастных агентов на биоспектротомографе протестированы пористые кремниевые наночастицы (PSI NPS) с естественным оксидным покрытием. Наблюдалось сильное сокращение времени поперечной релаксации протонов (T_2) для водных суспензий (PSI NPS). Значения продольной и поперечной relaxivity составили порядка 0,03 и 0,4 л/(г*с) соответственно, что позволяет говорить о высокой перспективе использования пористых кремниевых наночастиц в биомедицинских исследованиях.



Научной группой также разрабатываются новые методики мультиядерной МРТ. На биоспектротомографе получено распределение ядер дейтерия по различным отделам тела крыс (головной мозг, верхнегрудной, нижнегрудной, поясничный, крестцовый). Данное распределение фиксировалось с помощью ^2D ЯМР-спектров, а также с помощью ^2D МРТ-изображений различных отделов тела крыс, которые пили 1%-ый раствор D_2O . В результате анализа полученных спектров можно заключить, что в естественных концентрациях распределение дейтерия в тканях крысы

коррелирует с распределением водорода. Также показано нарушение корреляции при искусственном повышении концентрации дейтерия путем 2-недельного приема 1%-го раствора D₂O, а именно, концентрация ядер дейтерия выравнивается в органах жизнеобеспечения.

Большое значение уделяется экспериментам на ядрах фтора ¹⁹F. Высокое значение магнитного момента ядра фтора ¹⁹F и его 100%-ное природное содержание являются благоприятными факторами для его использования в МРТ. Показано, что применение стабильных субмикронных водных эмульсий нетоксичных перфторуглеродов (диаметр капель 70–100 нм) открывает возможность создать новый метод МРТ с регистрацией сигнала по ядрам фтора ¹⁹F (¹⁹F-МРТ), существенно расширяющий границы биомедицинских и технических приложений МРТ. Продемонстрировано, что эмульсии ПФУ могут быть использованы как транспортные платформы (контейнеры) для целевой доставки в органы и ткани лекарственных препаратов и контрастных агентов в режиме ¹⁹F-МРТ визуализации процессов фармакокинетики. В частности, исследованы свойства препарата Перфторан® («голубая кровь»), разрешенного Минздравом РФ к широкому применению в качестве кровезаменителя.



СОТРУДНИЧЕСТВО ЦМТС МГУ С ИНСТИТУТАМИ И НАУЧНЫМИ ГРУППАМИ В РОССИИ И ЗА РУБЕЖОМ

Сотрудничество в России:

1. Институт молекулярной биологии им. В.А.Энгельгардта Российской академии наук, Москва
2. Институт физики Казанского федерального университета, Казань
3. Институт физико-химической биологии им. А.Н.Белозерского МГУ, Москва
4. Центральный институт туберкулеза, Москва
5. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва
6. Институт биохимии им. А.Н.Баха Российской академии наук, Москва
7. Институт биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича Российской академии наук, Москва
8. Научно-исследовательский институт по изысканию новых антибиотиков имени Г.Ф.Гаузе, Москва
9. ООО «НПК «Наносистема», Москва
10. ФГУП «НЦ «Сигнал», Москва
11. Российский национальный исследовательский медицинский университет им. Н.И.Пирогова Министерства здравоохранения РФ, Москва
12. Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского Российской академии наук, Москва
13. Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской академии наук, Москва
14. Федеральный медицинский исследовательский центр психиатрии и наркологии имени В.П. Сербского Министерства здравоохранения РФ, Москва
15. Институт общей физики им. А.М.Прохорова Российской академии наук, Москва
16. Российский онкологический научный центр им. Н.Н. Блохина Министерства здравоохранения РФ, Москва
17. Московский научно-исследовательский онкологический институт имени П.А. Герцена, Москва

Международное сотрудничество:

1. MRC Biomedical NMR Centre, London, UK
2. The Wohl Institute, King's College London, UK
3. Institute of Biomedical Sciences, Academia Sinica, Taipei, Taiwan
4. University of Ulm, Ulm, Germany

ИЗБРАННЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ЗА 2014-2016 ГГ.

1. D.N. Silachev, L.S. Khailova, V.A. Babenko, M.V. Gulyaev, S.I. Kovalchuk, L.D. Zorova, E.Y. Plotnikov, Y.N. Antonenko, D.B. Zorov. Neuroprotective effect of glutamate-substituted analogue of gramicidin A is mediated by the uncoupling of mitochondria. *Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects*, **1840**(12):3434–3442, 2014. IF = 4.381
2. L.S. Khailova, D.N. Silachev, T.I. Rokitskaya, A.V. Avetisyan, K.G. Lyamzaev, I.I. Severina, T.M. Il'yasova, M.V. Gulyaev, V.I. Dedukhova, T.A. Trendeleva, E.Y. Plotnikov, R.A. Zvyagil'skaya, B.V. Chernyak, D.B. Zorov, Y.N. Antonenko, V.P. Skulachev. A short-chain alkyl derivative of Rhodamine 19 acts as a mild uncoupler of mitochondria and a neuroprotector. *Biochimica et Biophysica Acta - Bioenergetics*, **1837**(10):1739–1747, 2014. IF=5.353
3. M.B. Gongalsky, Yu V. Kargina, L.A. Osminkina, A.M. Perepukhov, M.V. Gulyaev, A.N. Vasiliev, Yu.A. Pirogov, A.V. Maximychev, V.Yu Timoshenko. Porous silicon nanoparticles as biocompatible contrast agents for magnetic resonance imaging. *Applied Physics Letters*, **107**(23): 233702–4, 2015. IF=3.302
4. D.N. Silachev, E.Y. Plotnikov, L.D. Zorova, I.B. Pevzner, N.V. Sumbatyan, G.A. Korshunova, M.V. Gulyaev, Yu.A. Pirogov, V.P. Skulachev, D.B. Zorov. Neuroprotective effects of mitochondria-targeted plastoquinone and thymoquinone in a rat model of brain ischemia/reperfusion injury. *Molecules*, **20**(8):14487–14503, 2015. IF= 2.416
5. D.N. Silachev, M.V. Gulyaev, L.D. Zorova, L.S. Khailova, L.V. Gubsky, Yu.A. Pirogov, E.Y. Plotnikov, G.T. Sukhikh, D.B. Zorov. Magnetic resonance spectroscopy of the ischemic brain under lithium treatment. Link to mitochondrial disorders under stroke. *Chemico-Biological Interactions*, **237**:175–182, 2015. IF= 2.577
6. M.V. Gulyaev, N.V. Anisimov, N.E. Ustyuzhanona, A.S. Dmitrenok, A.S. Shashkov, D.V. Yashunsky, L.L. Gervits, Yu.A. Pirogov, N.E. Nifantiev. Sensitivity of magnetic resonance imaging based on the detection of ¹⁹F NMR signals. *Mendeleev Communications*, **26**(1):24–25, 2016. IF=1.340
7. Е.А. Батуев, А.Ю. Лизунов, Е.А. Морозова, В.В. Ключков, Н.В. Ануфриева, Т.В. Демидкина, В.И. Польшаков (2014) ЯМР скрининг потенциальных ингибиторов *Citrobacter freundii* метионин γ -лиазы, *Мол. Биол.*, **48**(6): 1019-1029. IF = 0.658
8. K.V. Kudryavtsev, C.-C. Yu, P.M. Ivantcova, V.I. Polshakov, A.V. Churakov, S. Bräse, N.S. Zefirov, J.-H. Guh (2015) Structural studies and anticancer activity of a novel class of β -peptides, *Chemistry – An Asian Journal*. **10**(2): 383-389. IF = 3.935
9. V. Polshakov, B. Eliseev, L. Frolova, C.-F. Chang and T.-H. Huang (2015) Backbone ¹H, ¹³C and ¹⁵N resonance assignments of the human eukaryotic release factor eRF1, *Biomolecular NMR Assignments*, **9**(1): 37-42. IF = 0.820
10. E. Smirnova, I. Safenkova, V. Stein-Margolina, V. Shubin, V. Polshakov, B. Gurvits (2015) pH-responsive modulation of insulin aggregation and structural transformation of the aggregates, *Biochimie*, **109**(2): 49-59. IF = 3.142
11. S.A. Kozin, A.A. Kulikova, A.N. Istrate, P.O. Tsvetkov, S.S. Zhokhov, Y.V. Mezentsev, A.S. Ivanov, V. I. Polshakov, A.A. Makarov (2015) The English (H6R) familial Alzheimer's disease mutation facilitates zinc-induced dimerization of the amyloid- β metal-binding domain, *Metallomics*, **7**: 422-425. IF = 3.978
12. N. Logunova, M. Korotetskaya, V. Polshakov, A. Apt (2015) The QTL within the H2 Complex Involved in the Control of Tuberculosis Infection in Mice Is the Classical Class II H2-Ab1 Gene, *PLoS Genetics* **11**(11): e1005672, 1-22. IF=7.528.
13. A.B. Mantsyzov, Y. Shen, J.H. Lee, G. Hummer, A. Bax (2015) MERA: a webserver for evaluating backbone torsion angle distributions in dynamic and disordered proteins from NMR data, *Journal of Biomolecular NMR*, **63**(1): 85-95. IF=2.845
14. V.I. Polshakov, O.A. Petrova, Yu.Yu. Parfenova, S.V. Efimov, V.V. Klochkov, M.I. Zvereva, O.A. Dontsova (2016) NMR assignments of the N-terminal domain of *Ogataea polymorpha* telomerase reverse transcriptase, *Biomolecular NMR Assignments*, **10**:1-5. DOI: 10.1007/s12104-015-9663-6. IF = 0.820.
15. A.N. Istrate, S.A. Kozin, S.S. Zhokhov, A.B. Mantsyzov, O.I. Kechko, A. Pastore, A.A. Makarov, V.I. Polshakov (2016) Interplay of histidine residues of the Alzheimer's disease A β peptide governs its Zn-induced oligomerization. *Scientific Reports*, **6**, 21734; DOI: 10.1038/srep21734. IF = 5.578.
16. V.E. Pushkarev, V.V. Kalashnikov, A.Y. Tolbin, S.A. Trashin, N.E. Borisova, S.V. Simonov, V.B. Rybakov, L.G. Tomilova, N.S. Zefirov (2015) meso-Phenyltetraabenzotriazaporphyrin based double-decker lanthanide(III) complexes: synthesis, structure, spectral properties and electrochemistry, *Dalton Transactions*, **44**: 16553-16564. IF = 4.197
17. T.V. Dubinina, N.E. Borisova, M.V. Sedova, L.G. Tomilova, T. Furuyama, N. Kobayashi (2015) Synthesis and spectral properties of nonclassical binuclear thienoporphyrazines, *Dyes and Pigments*, **117**: 1-6. IF= 3.966
18. N.E. Borisova, A.A. Kostin, E.A. Eroshkina, M.D. Reshetova, K.A. Lyssenko, E.N. Spodine, L.N. Puntus (2014) Lanthanide Complexes with Tetradentate N,N',O,O'-Dipyridyl-Based Ligands: Structure, Stability, and Photophysical Properties, *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2219–2229. IF= 2.942

19. Chagarovskiy, A.O.; Budynina, E.M.; Ivanova, O.A.; Villemson, E.V.; Rybakov, V.B.; Trushkov, I.V.; Melnikov, M.Ya. (2014) Reaction of Corey Ylide with α,β -Unsaturated Ketones: Tuning of Chemoselectivity toward Dihydrofuran Synthesis. *Organic Letters*, **16**: 2830-2833. IF=6.364
20. Budynina, E.M.; Ivanova, O.A.; Chagarovskiy, A.O.; Grishin, Yu.K.; Trushkov, I.V.; Melnikov, M.Ya. (2015) Formal [3+2]-Cycloaddition of Donor-Acceptor Cyclopropanes to 1,3-Dienes: Cyclopentane Assembly. *Journal of Organic Chemistry*, **80**: 12212-12223. IF= 4.385.
21. Ivanov, K.L.; Villemson, E.V.; Budynina, E.M.; Ivanova, O.A.; Trushkov, I.V.; Melnikov, M.Ya. (2015) Ring Opening of Donor-Acceptor Cyclopropanes with the Azide Ion: A Tool for Construction of N-Heterocycles. *Chemistry – a European Journal*, **21**: 4975-4987. IF= 5.731
22. Rakhmankulov, E.R.; Ivanov, K.L.; Budynina, E.M.; Ivanova, O.A.; Chagarovskiy, A.O.; Skvortsov, D.A.; Latyshev, G.V.; Trushkov, I.V.; Melnikov, M.Ya. (2015) Lewis and Brønsted Acid Induced (3+2)-Annulation of Donor-Acceptor Cyclopropanes to Alkynes: Indene Assembly. *Organic Letters*, **17**: 770-773. IF=6.364
23. Ivanova, O.A.; Budynina, E.M.; Khrustalev, V.N.; Skvortsov, D.A.; Trushkov, I.V.; Melnikov, M.Ya. (2016) A Straightforward Approach to Tetrahydroindolo[3,2-b]carbazoles and 1-Indolyltetrahydrocarbazoles through [3+3] Cyclodimerization of Indole-Derived Cyclopropanes. *Chemistry – a European Journal*, **22**: 1223-1227. IF= 5.731
24. V.M. Muzalevskiy, Yu.A. Ustynyuk, I.P. Gloriov, V.A. Chertkov, A.Yu Rulev, E.V. Kondrashov, I.A. Ushakov, A.R. Romanov, V.G. Nenajdenko, (2015) Experimental and theoretical study of CF₃-group shift in the reaction of α -bromoones with 1,2-diamines, *Chemistry – A European Journal*, **21** (47): 16982- 16989. IF= 5.731
25. Topchiy, M. A.; Asachenko, A. F.; Nechaev, M. S. Solvent-Free Buchwald-Hartwig Reaction of Aryl and Heteroaryl Halides with Secondary Amines. *European Journal of Organic Chemistry* **2014**, 2014, 3319-3322. IF= 3.065
26. Morozov, O. S.; Lunchev, A. V.; Bush, A. A.; Tukov, A. A.; Asachenko, A. F.; Khrustalev, V. N.; Zalesskiy, S. S.; Ananikov, V. P.; Nechaev, M. S. (2014) Expanded-Ring N-Heterocyclic Carbenes Efficiently Stabilize Gold (I) Cations, Leading to High Activity in π -Acid-Catalyzed Cyclizations. *Chemistry – a European Journal*, **20**: 6162-6170. IF= 5.731
27. Morozov, O. S.; Asachenko, A. F.; Antonov, D. V.; Kochurov, V. S.; Paraschuk, D. Y.; Nechaev, M. S. (2014) Regio- and Stereoselective Dimerization of Arylacetylenes and Optical and Electrochemical Studies of (E)-1,3-Enynes. *Advanced Synthesis & Catalysis*, **356**: 2671-2678. IF=5.663



ЯМР в Институте проблем химической физики (ИПХФ РАН) начинается с 1961-го года, когда в лаборатории Г.Б. Манелиса была образована группа ЯМР, состоящая из молодых сотрудников Г.В. Лагодзинской и Л.Н. Ерофеева, ставшего впоследствии в 1982-м году заведующим лабораторией ЯМР. Были созданы современные по тем временам спектрометры ЯМР. В 1970-м году ЯМР спектрометр на сверхпроводящем магните с частотой 200 МГц, в 1974-м году ЯМР спектрометр с частотой 296 МГц, в 1979-м году – спектрометр твердого тела 60 МГц, разработанный совместно с Ленинградским СКБ АП.

В настоящее время экспериментальная база лаборатории ЯМР ИПХФ РАН представлена двумя спектрометрами фирмы Брукер:

1. Спектрометр высокого разрешения AVANCE III 500, входящий в состав научного оборудования аналитического центра (АЦКП) ИПХФ РАН.
2. Твердотельный спектрометр AVANCE III 400, в составе научного оборудования Центра коллективного пользования Научного центра РАН в Черноголовке (ЦКП НЦЧ РАН).

Основная задача ЦКП НЦЧ РАН – научная поддержка инновационных проектов в области наноматериалов и нанотехнологий, содействие выполнению фундаментальных и прикладных исследований по приоритетным направлениям науки, технологий и техники РФ. Центр коллективного пользования предоставляет свои услуги на возмездной основе на условиях, определяемых заключаемыми с заказчиком договорами на выполнение исследований.

ЦКП НЦЧ РАН КОНТАКТНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

142432, Московская обл., г. Черноголовка, ул. Лесная, д. 9

тел.: 8(496) 522-80-53,

kurkin@icp.ac.ru, kurkin@chg.ru

заведующий ЦКП НЦЧ РАН к.х.н. Куркин Евгений Николаевич

В структуре ИПХФ РАН лаборатория ЯМР входит в состав Аналитического центра коллективного пользования, задачей которого является обеспечение аналитическими данными сотрудников института при выполнении широкого круга фундаментальных и прикладных научных исследований. Использование научного оборудования при проведении научно-исследовательских работ внешних организаций проводится на основе договоров и контрактов с организациями-заказчиками.

АЦКП ИПХФ РАН КОНТАКТЫ

к.ф.-м.н. Домашнев Игорь Анатольевич

dia@icp.ac.ru

Тел.: 8(496)522-13-75

В лаборатории ЯМР осуществляется научно-образовательная деятельность: обучение студентов, проходящих производственную или преддипломную практику в ИПХФ РАН, а также студентов факультета фундаментальной физико-химической инженерии МГУ и студентов МФТИ, базирующихся в Черноголовке.

ЛАБОРАТОРИЯ ЯМР КОНТАКТНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Инновационный центр НЦЧ РАН

142432, Московская обл., г. Черноголовка, ул. Лесная, д. 9

тел. +7 (49652) 28037



НАШЕ ОБОРУДОВАНИЕ

Bruker Avance III 500

Датчики:

Двухканальные датчики прямого наблюдения (ВВО) 5 и 10 мм.

Датчики позволяют проводить эксперименты с облучением образца на частоте резонанса $^1\text{H}/^{19}\text{F}$ и на частотах в диапазоне ^{109}Ag – ^{31}P , оснащены z-градиентом, что позволяет проводить большинство стандартных ЯМР-измерений в области органической химии.

Bruker Avance III 400 WB

Датчики:

1) Датчик 5 мм для изучения самодиффузии Diff60 с импульсным z-градиентом магнитного поля. Набор сменных вставок для прямой регистрации спектров на ядрах ^1H , ^2H , ^7Li , ^{13}C , ^{19}F , ^{23}Na , ^{31}P , ^{133}Cs .

Особенности: Прибор оснащен блоком импульсного градиента магнитного поля (ИГМП) для получения высоких амплитуд градиента магнитного поля и соответствующим датчиком с активно экранированной градиентной катушкой. Максимальная амплитуда градиента магнитного поля составляет 3000 Гс/см. Сменные РЧ катушки обеспечивают высокую чувствительность на исследуемых ядрах. Допустимый температурный диапазон измерений $-40 \div +80$ °С. На ядрах ^1H имеется возможность исследования в расширенном диапазоне температур $-100 \div +200$ °С.

2) Датчик ЯМР широких линий для X ядер с расширенным температурным диапазоном

Особенности: Широкополосный датчик предназначен для получения спектров на различных гетероядрах в диапазоне частот от ^{15}N до ^{31}P . Широкий температурный диапазон – от комнатной до $+800$ °С

3) Датчик для ЯМР широких линий в твердом теле для ядер $^1\text{H}/^{19}\text{F}$ с расширенным температурным диапазоном для ампул 5 мм.

Особенности: Датчик позволяет регистрировать широкополосные сигналы ЯМР в твердом теле на ядрах ^1H и ^{19}F . Температурный диапазон от комнатной температуры до $+500$ °С.

4) Датчик ЯМР высокого разрешения в твердых телах с вращением под магическим углом

Особенности: Двухканальный датчик $^1\text{H}/^{19}\text{F}$ -X с роторами 3,2 мм. Канал гетероядер может быть настроен на частоты в диапазоне от ^{15}N до ^{31}P , для получения спектров на большом числе ядер элементов периодической таблицы. Возможность проведения экспериментов по двойному резонансу, проведения экспериментов с одновременной развязкой X ядер от ^1H и ^{19}F . Максимальная частота вращения под магическим углом 24 кГц.

СОТРУДНИКИ ЛАБОРАТОРИИ



Волков Виталий Иванович, заведующий лабораторией, д.ф.-м.н., профессор
Область научных интересов: магнитный резонанс в синтетических и биологических мембранах, полимерные электролиты
e-mail: vitwolf@mail.ru
моб: 8(905)714-79-61



Тарасов Виктор Петрович, старший научный сотрудник, к.ф.-м.н.
Область научных интересов: ЯМР в твердой фазе, ЯМР томография
e-mail: tarasov.07@list.ru



Забродин Владимир Алексеевич, старший научный сотрудник, к.т.н.
Область научных интересов: научное приборостроение, ЯМР спектроскопия высокого разрешения
e-mail: zva@icp.ac.ru



Черняк Александр Владимирович, старший научный сотрудник, к.х.н.
Область научных интересов: ЯМР в твердых неорганических электролитах, ЯМР спектроскопия высокого разрешения производных фуллеренов
e-mail: chernyak@icp.ac.ru



Шумм Борис Аркадьевич, ведущий инженер, к.ф.-м.н.
Область научных интересов: ЯМР в твердой фазе, ЯМР томография
e-mail: bshumm@yandex.ru



Авилова Ирина Алексеевна, инженер-исследователь
Область научных интересов: ЯМР в биологических мембранах и биологически активных соединениях
e-mail: irkaavka@gmail.com



Васильев Сергей Геннадьевич, научный сотрудник, к.ф.-м.н.
Область научных интересов: многоквантовая динамика ЯМР, многоимпульсные эксперименты, разветвленные полимеры
e-mail: viessw@mail.ru



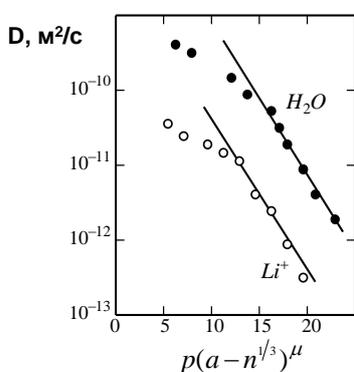
Слесаренко Никита Андреевич, аспирант
Область научных интересов: каликсарены, литиевые источники тока
e-mail: wownik007@mail.ru

Задачи, решаемые с помощью диффузионного датчика - исследования свойств коллоидных систем, строения и динамики полимеров, анализ смесей веществ, многокомпонентных и агрегирующих систем, исследование механизмов ионного и молекулярного транспорта в полимерных электролитах, неорганических ион-проводящих системах, пористых средах, синтетических и биологических мембранах.

НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ЯМР ИССЛЕДОВАНИЙ

Установлены механизмы ионного транспорта в полимерных и неорганических электролитах для топливных элементов (ионообменные полимерные мембраны, суперионики, гетерополисоединения). Созданы научные основы для синтеза новых высокоэффективных материалов.

Механизм ионного и молекулярного транспорта в ионообменных мембранах по данным ЯМР



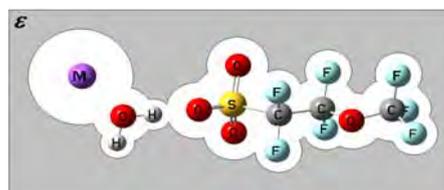
Расчет структуры гидратных комплексов катионов $M(H_2O)_h^+$ из спектров ЯМР 1H , 7Li , ^{23}Na , ^{133}Cs . Теоретическое описание ионного и молекулярного транспорта на основании теории протекания. Параметры p, a, μ характеризуют структуру комплексов, n - количество молекул воды на сульфогруппу, h - число гидратации.

Зависимость коэффициентов самодиффузии воды и катионов Li^+ от влагосодержания полученная методом ЯМР с ИГМП в перфторированных мембранах типа Нафион. Линии – расчет.

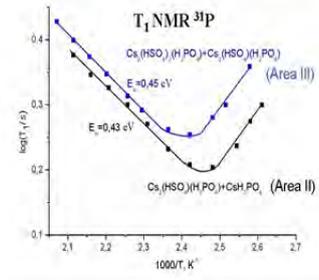
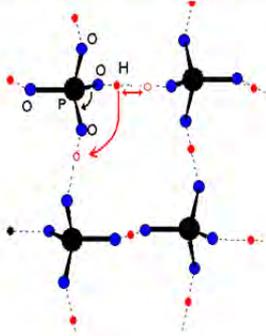
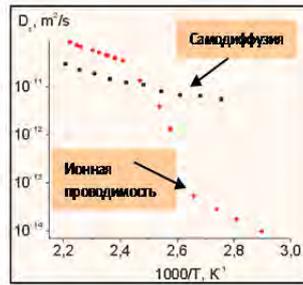
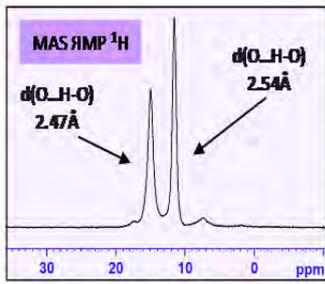
$$D = D_0 \exp[p(a - n^{1/3})^\mu]$$

$n \approx h$ - порог протекания

Гидраторазделенная ионная пара репрезентативного фрагмента мембраны в воде



Контактная ионная пара при влагосодержании 3 молекулы воды на ионную пару $LiSO_3-R$, $n \sim h$



Изучение строения, динамики, механизмов ионного и молекулярного транспорта в твердых неорганических ион проводящих системах

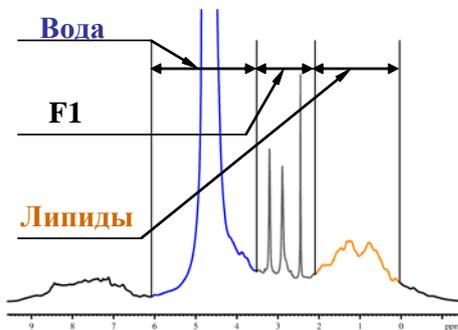
Установлен детальный механизм протонной проводимости в суперионных композитных материалах $Cs_{x+y}(HSO_4)_x(H_2PO_4)_y$. На основании данных ЯМР 1H , ^{31}P и импедансометрии выделены элементарные стадии переноса протона. Предложен оптимальный состав композитного материала для использования в качестве протонпроводящей мембраны в топливном элементе с протонной проводимостью в 1,5-2 раза выше, чем в исходных компонентах.

Латеральная диффузия и молекулярный обмен в эритроцитах



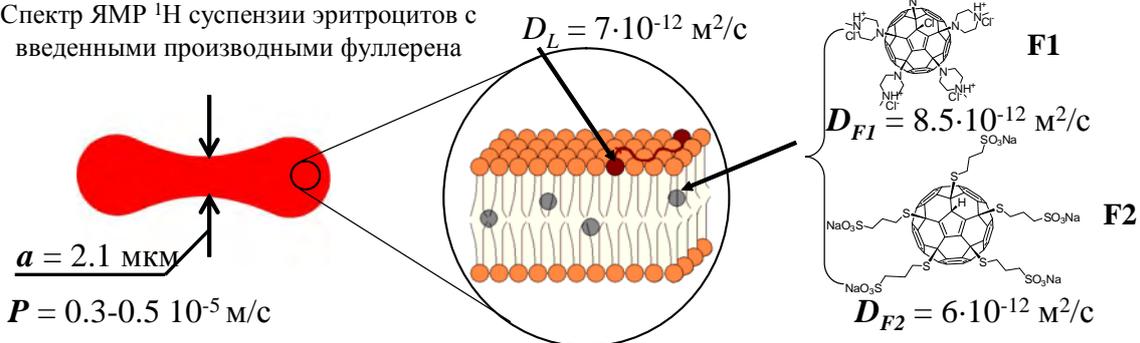
Латеральная диффузия и молекулярный обмен в эритроцитах

Авилова И.А., Волков В.И. (лаб. ЯМР); Котельников А.И., Котельникова Р.А. (ОКХиБП); Трошин П.А., Хакина Е.А. (лаб. ФМЭМ)

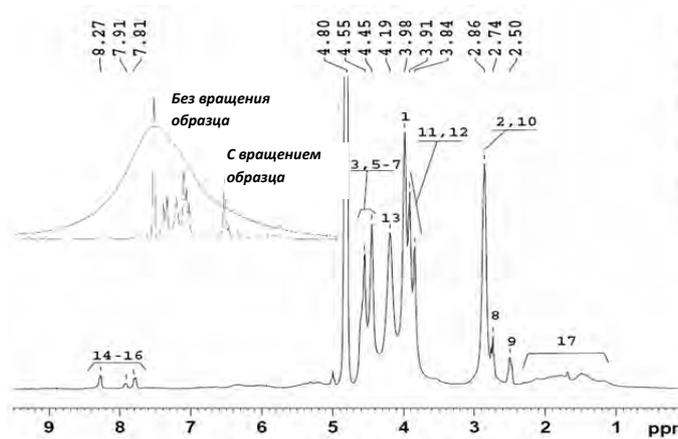


Спектр ЯМР 1H суспензии эритроцитов с введенными производными фуллерепа

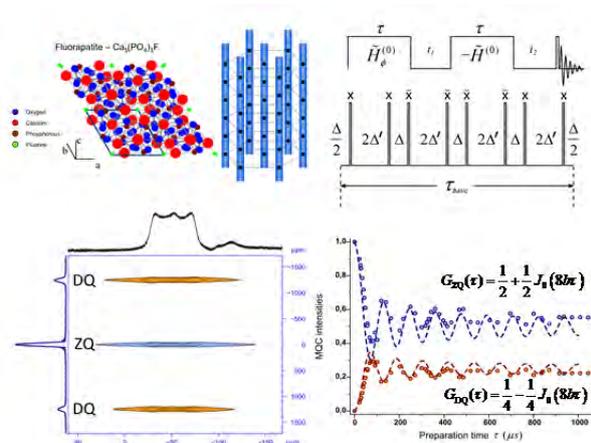
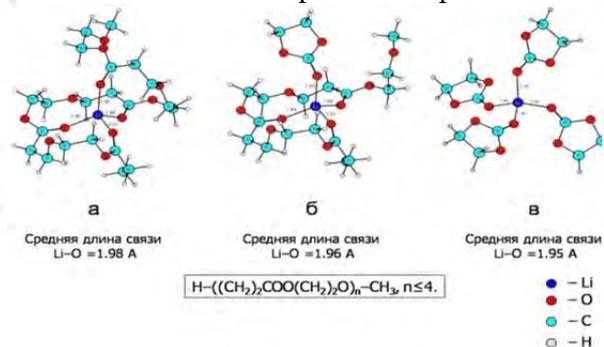
Методом ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля измерены размеры клеток (a), проницаемость клеточной мембраны (P) для молекул воды, коэффициенты латеральной диффузии липидов (D_L) и диффузии производных фуллеренов (D_{F1} , D_{F2}). Установлено, что водорастворимые производные фуллеренов включаются в липидные бислои мембран. Полученные результаты будут способствовать выявлению механизма целевой доставки биологически активных соединений в клетки эритроцитов.



Разработана методика исследования молекулярного обмена в биологических клетках, что необходимо для изучения процессов метаболизма в живых системах. Предложены методы измерения проницаемости биологических мембран.



Выявлены особенности ионного переноса в литиевых источниках тока (литиевых батареях). Сформулированы требования к составу компонентов литиевых батарей на основе гелевых полимерных электролитов.



Исследование многоквантовой динамики ЯМР спинов 1/2 в твердых телах.

Многоквантовая (МК) спектроскопия ЯМР является эффективным методом изучения размеров, подвижности и пространственного распределения многоспиновых кластеров в твердых телах. Последовательная квантовомеханическая теория в настоящее время развита только для одномерных систем. Современные исследования многоквантовой динамики ЯМР одномерных систем, таких как цепочки спинов ^{19}F во фтористом апатите кальция $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{F}$, связаны с проблемами передачи квантовой информации и исследованием процессов декогеренции.

Исследование полимеров: Методом ЯМР удастся установить среднюю молекулярную массу полимера и состав чередующихся звеньев.

Исследованы способы агрегации фталоцианидных комплексов, которые находят применение в устройствах молекулярной электроники, химических сенсорах, катализе.

Разработан ряд методик по определению концентраций различных водно-органических смесей. Подтвержден состав впервые синтезированных в ИПХФ биядерных нитрозильных комплексов железа, которые могут использоваться в качестве доноров NO в организме человека.

На нашем оборудовании проводится большой цикл работ по изучению скорости изотопного обмена.

Методом ЯМР показано образование комплексов фотосенсибилизаторов, оказывающих фотодинамическое воздействие на опухолевые клетки.

Различными методами ЯМР охарактеризован широкий класс замещенных фуллеренов, детально изучены процессы ассоциации производных фуллеренов.

СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ

1. В. И. Волков, Е. В. Волков, С. В. Тимофеев, Е. А. Сангинов, А. А. Павлов, Е. Ю. Сафронова, И. А. Стенина, А. Б. Ярославцев. Диффузионная подвижность катионов щелочных металлов в перфторированных сульфокатионных и карбоксильных мембранах по данным ЯМР на ядрах ^1H , ^7Li , ^{23}Na , ^{133}Cs . // Журнал неорганической химии, №3, 2010, с. 358–363.
2. Волков В.И., Павлов А.А., Федотов Ю.А., Маринин А.А. Особенности самодиффузии воды и катионов щелочных металлов в системах бисульфосодержащие ароматические полиамиды - вода. // Журнал физической химии, 2010, т. 84, №10, С 1–7.
3. В. И. Волков, Е. В. Волков, С. В. Тимофеев, Е. А. Сангинов, А. А. Павлов, Е. Ю. Сафронова, И. А. Стенина, А. Б. Ярославцев. Самодиффузия воды и ионная проводимость в перфторированных сульфокатионных мембранах МФ-4СК. // Журнал неорганической химии, №3, 2010, с. 355–357.
4. Шестаков С.Л., Павлов А.А. Максимычев А.В. и др. // Химическая физика, 2010, т.29, №10, с. 77.
5. S. L. Shestakov, A. A. Pavlov, A. V. Maksimychyev, A. V. Chernyak, V. I. Volkov, S. V. Timofeev. A NMR Study of the Hydration of Sulfo and Carboxyl Groups in Perfluorinated Cation Exchange Membranes. // Russian Journal of Physical Chemistry B, 2010, Vol. 4, No. 6, pp. 1005–1013.
6. M. Chukanova, K. A. Alpherov, Y. M. Shul'ga, A. V. Chernyak, K.V. Van, G. P. Belov. The application of supported palladium catalysts in co- and terpolymerization reaction of carbon monoxide with olefins. // Palladium: Compounds, Production and Applications 2010, Chapter 8, 15.
7. Н.Ф. Гольдшлегер, А.В. Черняк, И.П. Калашникова, В.Е. Баулин, А.Ю. Цивадзе. Окта-(бензо-15-краун-5)фталоцианинат магния в растворах додецилсульфата натрия: исследование методами электронной и ЯМР ^1H спектроскопии. // Журнал общей химии, 2011.
8. Д. А. Крицкая, Э. Ф. Абдрашитов, В. Ч. Бокун, А. Н. Пономарев, А. В. Черняк, С. Г. Васильев, В. И. Волков. ЯМР исследование сорбционно-диффузионных свойств композитных мембран “МФ-4СК-углеродная фаза” в водно-метанольном растворе. // Мембраны и мембранные технологии, 2011, Т.1, № 4, с. 266–275.
9. I.V. Vystorop, N.P. Konovalova, T.E. Sashenkova, E.N. Berseneva, A.V. Chernyak, B.S. Fedorov, R.G. Kostyanovsky. 1-Hydroxy-8-methyl-1,4,8-triazaspiro[4,5]decan-2-one and its (\pm)-3-methyl homologue: regioselective synthesis and *in vivo* evaluation as adjuvants in leukemia chemotherapy. // Mendeleev Communication, 2011, V. 21, No. 5, P. 488.
10. Л. А. Сырцова, Н. А. Санина, Б. Л. Психа, А. В. Куликов, А. В. Черняк, Н. И. Шкондина, Т. Н. Руднева, О. В. Шапошникова, А. И. Котельников, С. М. Алдошин. Влияние растворителя на гидролиз нитрозильного комплекса железа $\{\text{Fe}_2[\text{S}(\text{CH}_2)_2\text{NH}_3]_2(\text{NO})_4\}\text{SO}_4 \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$: спектроскопические и кинетические исследования его мономерной и димерной форм. // Известия Академии наук. Серия химическая, 2011, № 6, с. 1119–1124.
11. Е.Ю. Сафронова, В.И. Волков, А.А. Павлов, А.В. Черняк, Е.В. Волков, А.Б. Ярославцев. Особенности гидратации ионов H^+ , Li^+ , Na^+ , Cs^+ в перфторированных сульфокатионных мембранах МФ-4СК модифицированных неорганическими допантами. // Журнал неорганической химии, 2011, том 56, №2, с. 192–198.
12. E.Yu. Safronova, V.I. Volkov, A.V. Yaroslavtsev Ion mobility and conductivity of hybrid ion-exchange membranes incorporating inorganic nanoparticles. // Solid State Ionics, 188 (2011) 324–328.
13. V.I. Volkov, A.A. Pavlov, E.A. Sanginov Ionic transport mechanism in cation exchange membranes studied by NMR techniques. // Solid State Ionics 188 (2011) 124–128.
14. I.V. Vystorop, N.P. Konovalova, T.E. Sashenkova, E.N. Berseneva, A.V. Chernyak, B.S. Fedorov, R.G. Kostyanovsky. 1-Hydroxy-8-methyl-1,4,8-triazaspiro[4,5]decan-2-one and its (\pm)-3-methyl homologue: regioselective synthesis and *in vivo* evaluation as adjuvants in leukemia chemotherapy. // Mendeleev Communication, 2011, V. 21, No. 5, P. 488.
15. А.Б. Соловьева, Н.А. Аксенова, Н.Н. Глаголев, Н.С. Мелик-Нубаров А.В. Иванов, В.И. Волков, А.В. Черняк Амфифильные полимеры в фотодинамической терапии. // Химическая физика – 2012. – Т.31. – N.6. – с.72–79.
16. Н.Ф. Гольдшлегер, А.В. Черняк, И.П. Калашникова, В.Е. Баулин, А.Ю. Цивадзе. Окта-(бензо-15-краун-5)фталоцианинат магния в растворах додецилсульфата натрия: исследование методами электронной и ЯМР ^1H спектроскопии. // Журнал общей химии – 2012. – Т.82. - N.5. – с. 856–865.
17. О. М. Чуканова, К. А. Алферов, А. В. Черняк, Е. О. Перепелицина, Г. П. Белов Синтез поли(монооксид углерода-СО-этилен-СО-пропилен) на нанесенных палладиевых катализаторах. // Высокомолекулярные соединения, Серия Б. – 2012. - Т.54. - № 2. - с.314–319.
18. В.М. Бузник, Ю.Е. Вopiлов, В.К. Иванов, А.С. Сигачев, В.С. Поляков, М.А. Смирнов, Т.П. Кулагина, Ю.В. Сорокин, В.П. Тарасов, Е.П. Харитоновна, Г.Ю. Юрков. Строение порошков политетрафторэтилена, полученных фотохимической полимеризацией газообразного мономера. // Перспективные материалы 2012 №4, с. 44–52.
19. S.V. Chapyshev, A.V. Chernyak. Synthesis of 2,4,6-Triazidopiridine and its 3,5-Diiodo derivative. // Synthesis. – 2012. – V.44. – No 20. p. 3158–3160.
20. A.A. Yurkova, E.A. Khakina, S.I. Troyanov, A.Chernyak, L. Shmygleva, A.S. Peregudov, V.M. Martynenko, Y.A. Dobrovolskiy, P.A. Troshin, Arbusov chemistry with chlorofullerene C_{60}Cl_6 : a powerful method for selective synthesis of highly functionalized [60]fullerene derivatives. // Chem. Commun. - 2012. – V.48. – P.8916–8918.

21. N. A. Aksenova, T. Oles, T. Sarna, N. N. Glagolev, A. V. Chernjak, V. I. Volkov, S. L. Kotova, N. S. Melik-Nubarov and A. B. Solovieva. Development of Novel Formulations for Photodynamic Therapy on the Basis of Amphiphilic Polymers and Porphyrin Photosensitizers. Porphyrin-Polymer Complexes in Model Photosensitized Processes. // *Laser Physics*. - 2012. - V. 22. - N.10. - p.1642–1649.
22. A. I. Chikin, A. V. Chernyak, Zhao Jin, Yu. S. Naumova, A. E. Ukshe, N. V. Smirnova, V. I. Volkov, Y. A. Dobrovolsky. Mobility of protons in 12-phosphotungstic acid and its acid and neutral salts. // *Journal of Solid State Electrochemistry* – 2012. V.18, N 8, P.2767–2775.
23. И. П. Ким, А. А. Куница, А. В. Черняк. Идентификация концевых групп теломеров тетрафторэтилена с тетрагидрофураном методом ЯМР. // *Журнал физической химии*, 2013, Т.87, №11, с. 1871–1876.
24. И. В. Выстороп, Н.П. Коновалова, Ю.В. Нелюбина, А.В. Черняк, Т.Е.Сашенкова, Е.Н. Климанова, А.Н. Утеньшев, Б.С. Федоров, Г.В. Шилов, Р.Г. Костяновский. Циклические гидроксамовые кислоты на основе α -аминокислот. Сообщение 2. Региоселективный синтез, кристаллическая структура и противоопухолевая активность спиропиперидин-имидазолидин-гидроксамовых кислот на основе глицина и DL-аланина. // *Известия Академии Наук. Серия химическая*, 2013, №5, с.1272–1281.
25. Г.Б. Манелис, Г.В. Лагодзинская, А.И. Казаков, А.В. Черняк, Н.Г. Юнда, Л.С. Курочкина. Влияние надмолекулярной структуры жидкой реакционной среды на кинетику окисления ацетона водными растворами азотной кислоты // *Известия Академии Наук. Серия химическая*, 2013, №4, с.994–1002.
26. О. М. Чуканова, К. А. Алферов, А. В. Черняк, Смирнов М. А., Г. П. Белов. Соолигомеризация монооксида углерода с циклическими олефинами на нанесенных палладиевых катализаторах. // *Высокомолекулярные соединения. Серия Б*, 2013, Т.55, № 10, с.1307–1312.
27. М.А. Смирнов, В.П. Тарасов, В.М. Бузник, А.С. Кантаев, А.Н. Дьяченко. ЯМР-исследования строения композитов на основе политетрафторэтилена и гексафторсиликата аммония. // *Журнал структурной химии*, 2013, Т.54, приложение 1, с. 173–177.
28. Ю.М. Шульга, М.А. Смирнов, В.П. Тарасов, В.И. Волков, С.А. Баскаков, Г.А. Кичигина, П.П. Куш, Д.П. Кирюхин, А.Л. Гусев. Исследование методом твердотельной ЯМР спектроскопии политетрафторэтилена, образующегося при низкотемпературной радиационной полимеризации C_2F_4 в присутствии восстановленного оксида графита. // *Альтернативная энергетика и экология*, 2013, Т. 2, №3, с.103–105.
29. Волков В.И., Маринин А.А. Применение методов ЯМР в исследовании ионного и молекулярного транспорта в полимерных электролитах. // *Успехи химии*, 2013, Т.82, №3, с. 248–272.
30. А. Крицкая, А. В. Черняк, С. Г. Васильев, Э. Ф. Абдрашитов, В. Ч. Бокун, А. Н. Пономарев, А. С. Дмитрук, В. И. Волков. ЯМР исследование водно-метанольного раствора, сорбированного в сульфокатионные мембраны МФ-4СК. // *Мембраны и мембранные технологии*, 2013, том 3, № 4, с. 245–251.
31. А. В. Черняк, А. В. Чуб, Е. А. Сангинов, П. Ю. Барзилович. Исследование наноструктурированного вольфрамфосфата аммония методом спектроскопии ЯМР. // *Известия Академии наук. Серия химическая*, 2013, № 8, 1798–1802.
32. Н.П. Коновалова, И.В. Выстороп, Т.Е. Сашенкова, Е.Н. Климанова, Д.В. Мищенко, У.Ю. Аллаярова, С.А. Гончарова, Т.А. Раевская, Т.Н. Якущенко, А. В. Черняк. Циклические гидроксамовые кислоты как хемосенсибилизаторы цитостатической терапии. // *Вопросы онкологии*, 2013, 5, Т.59, с. 620.
33. A.F. Shestakov, A.V. Chernyak, N.V. Lariontseva, S.A. Golovanova, A.P. Sadkov, Levchenko L.A. Stoichiometric oxidation of quercetin by $HAuCl_4$, which is accompanied by H-D exchange with the solvent. // *Mendeleev Communication*, 2013, V.23, №2, P.98–100.
34. О. М. Чуканова, К. А. Алферов, А. В. Черняк, Г. П. Белов. Синтез терполимеров монооксида углерода, этилена и стирола на нанесенных палладиевых катализаторах. // *Высокомолекулярные соединения. Серия Б*, 2013, Т.55, № 1, с.80–88.
35. S. G. Vasil'ev, V. I. Volkov, E. A. Tatarinova, A. M. Muzafarov. A solid state NMR investigation of MQ silicone copolymers. // *Appl Magn Reson*. 2013; 44: p.1015–1025.
36. N.A. Sanina, G.I. Kozub, T.A. Kondrat'eva, G.V. Shilov, D.V. Korchagin, N.S. Emel'yanova O.Kh. Poleshchuk, A.V. Chernyak, A.V. Kulikov, F.B. Mushenok, N.S. Ovanesyan, S.M. Aldoshin. Structure and properties of bis(1-phenyl-1h-tetrazole-5-thiolate)diiron tetranitrosyl. // *Journal of Molecular Structure*, 2013, V.1041, p.183–189.
37. Коплак О.В., Дмитриев А.И., Васильев С.Г., Штейнман Э.А., Моргунов Р.Б. Электронная и ядерная спиновая динамика в пластически деформированных кристаллах кремния, обогащенных изотопом ^{29}Si . // *ЖЭТФ*, 2014, Т. 145, №4, с. 709–718.
38. И.А. Авилова, В.М. Бузник, В.И. Волков, Г.Ф. Железина, Е.В. Морозов, А.Е. Раскутин, О.В. Фалалеев. Исследования взаимодействия воды с полимерными композиционными материалами методом ядерного магнитного резонанса. // *Авиационные материалы и технологии* 2014, S1, с. 30–36.
39. E.A. Khakina, A.A. Yurkova, A.V. Novikov, N.P. Piven, A.V. Chernyak, A.S. Peregodov, P.A. Troshin. Radical reaction of $C_{70}Cl_{10}$ with $P(OEt)_3$: isolation and characterization of $C_{70}[P(O)(OEt)_2]_nH_n$ ($n = 1, 2$). // *Mendeleev Commun.*, 2014, V.24, P.211–213.

40. Ярмоленко О.В., Хатмуллина К.Г., Богданова Л.М., Шувалова Н.И., Джавадян Э.А., Маринин А.А., Волков В.И. Влияние добавки наночастицы TiO_2 на проводимость сетчатых полимерных электролитов для литиевых источников тока. // *Электрохимия*, 2014, Т. 50, № 4, с. 377–386.
41. S.G. Vasil'ev, V.I. Volkov, E.A. Tatarinova, A.M. Muzafarov. Study of Self-Diffusion of Silicone MQ Resins in Chloroform Solutions by Pulsed Field-Gradient NMR Spectroscopy. // *Applied Magnetic Resonance*, 2014, Vol. 45, Issue 4, pp. 315–328.
42. A.V. Chernyak, V.I. Volkov. NMR Investigations of the Protonic Transport Mechanism in Composed Materials on the Basis of Cesium Acid Sulfates and Phosphates. // *Applied Magnetic Resonance*, 2014, V. 45, Issue 3, pp. 287–299.
43. И.А. Авилова, С.Г. Васильев, Л.В. Римарева, Е.М. Серб, Л.Д. Волкова, В.И. Волков. Водный обмен в клетках дрожжей *Saccharomyces cerevisiae* рас Y-3137 и Y-3327 по данным ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля. // *Журнал физической химии*, 2015, 89, 4, 708–712.
44. Ярмоленко О.В., Юдина А.В., Маринин А.А., Черняк А., Волков В.И., Шувалова Н.И., Шестаков А.Ф. Нанокompозитные сетчатые полимерные гель-электролиты. Влияние наночастиц TiO_2 и Li_2TiO_3 на структуру и свойства. // *Электрохимия*, 2015, 51, 5, 479–488.
45. Ярмоленко О.В., Юдина А.В., Евщик Е.Ю., Черняк А.В., Маринин А.А., Волков В.И., Кулова Т.Л. Новые сетчатые гель-электролиты состава ДАК-ПЭГ- LiBF_4 - VMIBF_4 с введением алкилкарбонатов: механизм ионного транспорта и свойства. // *Электрохимия*, 2015, 51, 5, 489–496.
46. Черняк А.В., Юдина А.В., Ярмоленко О.В., Волков В.И. Исследование системы 3-бутил-1-метилимидазолий тетрафторборат - пропиленкарбонат/ этиленкарбонат в составе полимерного электролита методом ЯМР. // *Электрохимия*, 2015, 51, 5, 551–555.
47. Ярмоленко О.В., Юдина А.В., Игнатова А.А., Шувалова Н.И., Мартыненко В.М., Богданова Л.М., Черняк А.В., Забродин В.А., В.И. Волков. Новые полимерные электролиты состава диакрилат полиэтиленгликоля - LiBF_4 - тетрафторборат 1-этил-3-метилимидазолия с введением алкиленкарбонатов. // *Известия Академии наук. Серия химическая*, 2015, 63, 10, 2505–2511.
48. С. И. Доронин, С. Г. Васильев, А. А. Самойленко, Э. Б. Фельдман, Б. А. Шумм. Динамика и релаксация многоквантовых когерентностей ЯМР в квазиодномерной цепочке ядерных спинов ^{19}F во фтористом апатите кальция. // *Письма в ЖЭТФ*, 2015, 101, 9, 687–692.
49. Н.М. Бравая, Е.Е. Файнгольд, А.Н. Галиуллин, О.Н. Бабкина, С.Л. Саратовских, А.В. Черняк, В.Д. Махаев. Алкилирование толуола дихлорметаном в присутствии триизобутилалюминия и перфторфенилборатов. // *Известия Академии наук. Серия химическая*, 2015, 9, 2076.
50. M.F. Budyka, T.N. Gavrishova, N.I. Potashova, A.V. Chernyak. Stereo- and regioselective [2+2] photocycloaddition in a bis(styrylquinoline) dyad. // *Mendeleev Commun*, 2015, 25, 106–108.
51. D.A. Kuznetsov, I.V. Fedyanin, N.S. Komarova, G.V. Shilov, V.M. Martynenko, S.G. Vasil'ev, A.G. Krivenko, K.A. Lyssenko, T.A. Bazhenova. Developing Pathways to the Synthesis of Low-Valence Molybdenum Methoxides: Preparation, Characterization, and Redox Chemistry of Dimeric and Tetrameric Molybdenum Alkoxide Clusters. // *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2015, 4, 715–724.
52. V V Kardumyan, N A Aksenova, A A Chernyak, N N Glagolev, V I Volkov, A B Solovieva. The influence of temperature on the photo-oxidation rate of tryptophan in the presence of complexes of porphyrins with amphiphilic polymers. // *Laser Physics*, 2015, 25, 4, 046002.
53. A.V. Akkuratov, D.K. Susarova, O.V. Kozlov, A.V. Chernyak, Y.L. Moskvina, L.A. Frolova, M.S. Pshenichnikov, P.A. Troshin. Design of (X-DADAD) $_n$ Type Copolymers for Efficient Bulk Heterojunction Organic Solar Cells. // *Macromolecules*, 2015, 48, 7, 2013–2021.
54. A.V. Akkuratov, D. Susarova, Y. Moskvina, D.A. Anokhin, A. Chernyak, F.A. Prudnov, D.V. Novikov, S. Babenko, P. Troshin. Strong influence of positioning of solubilizing alkyl side chains on optoelectronic and photovoltaic properties of TTBVTT-based conjugated polymers. // *Journal of Materials Chemistry C*, 2015, 3, 1497.
55. С. А. Баскаков, А. С. Лобач, С. Г. Васильев, Н. Н. Дремова, В. М. Мартыненко, А. А. Арбузов, Ю. В. Баскакова, А. А. Володин, В. И. Волков, В. А. Казаков, Ю. М. Шульга. Особенности высокотемпературной карбонизации гуминовых кислот и композита гуминовых кислот с оксидом графена. // *Химия высоких энергий*, 2016, Т. 5, №1, с. 46–54.
56. I.A. Avilova, A.V. Smolina, A.I. Kotelnikov, R.A. Kotelnikova, V.V. Loskutov, V.I. Volkov. Self-diffusion of water and blood lipids in mouse erythrocytes. *Applied Magnetic Resonance* (in press DOI 10.1007/s00723-015-0759-z) Published online 6 January 2016.
57. I.A. Avilova, A.V. Chernyak, A.V. Zhilenkov, P.A. Troshin, V.I. Volkov. The self-organization of water soluble fullerene derivatives studied by pulsed field gradient NMR *Mendeleev Communications* (in press DOI: 10.1016/j.mencom.2016.03.____).
58. V.M. Bouznic, E.V. Morozov, I.A. Avilova, V.I. Volkov. NMR applications for polymer composite materials moisture uptake investigation. // *Applied Magnetic Resonance* (in press DOI 10.1007/s00723-015-0748-2) Published online 6 January 2016.

Центр коллективного пользования ЮФУ «Молекулярная спектроскопия»

344090, Ростов-на-Дону, пр.Стачки, 194/2,

НИИ физической и органической химии ЮФУ

к. 112, т. 8(863) 243-38-94, факс 8 (863) 243-47-00,

nmr@ipoc.sfedu.ru

РУКОВОДИТЕЛЬ

Бородкин Геннадий Сергеевич, зав. лабораторией ядерного магнитного резонанса НИИ физической и органической химии ЮФУ, канд. хим. наук.

ЗАДАЧИ, РЕШАЕМЫЕ ЦКП «МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ»

Полное спектрально-аналитическое обеспечение междисциплинарных образовательных программ «Медицинская химия», «Сверхкритические флюидные технологии», «Органические хемосенсоры», «Современные проблемы химии»; инициативных грантов РФФИ; фундаментальных и прикладных исследований проводимых в НИИ и ВУЗах Южного и Северо-кавказского федеральных округов (Ростова, Краснодара Волгограда и Ставрополя, а также республик Северного Кавказа). Изучение методами спектроскопии ЯМР, ЭПР, ИК объектов окружающей среды и вновь синтезируемых соединений.

На базе ЦКП выполняются курсовые и дипломные работы студентов химического и физического факультетов. Обучение студентов и молодых ученых ЮФУ методам проведения расчетов с помощью современных лицензионных пакетов Gaussian03, Molpro, NWChem и эффективному использованию вычислительных ресурсов.

Структура ЦКП

Лаборатория ядерно-магнитного резонанса (ЯМР) НИИ ФОХ ЮФУ.

Лаборатория электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) НИИ ФОХ ЮФУ

ЛАБОРАТОРИЯ ЯМР

- руководитель:

Бородкин Геннадий Сергеевич, зав. лаб. ЯМР, к.х.н.,

- персонал:

Черныш Юрий Ефимович (вед. науч. сотр., д.х.н.)

Мальцев Юрий Федорович (ст. науч. сотр., к.ф.-м.н.)

Бородкина Инна Геннадьевна (н.с., к.х.н.,)

Метелица Ирина Александровна (н.с., к.х.н.,)

Чепурной Павел Борисович (вед. инж.)

Станкевич Наталья Викторовна (инж.)

Интегрированная аналитическая LC-SPE-NMR-MS система AVANCE-600 (Bruker) 2007 г.



Фундаментальные и прикладные исследования объектов окружающей среды и вновь синтезируемых соединений: идентификация химической структуры компонентов сложных смесей органических соединений как синтетического, так и природного происхождения; Определение чистоты соединений.

ЯМР-Фурье спектрометр UNITY-300 (Varian) 1990 г.



Регистрация спектров всех возможных ЯМР-активных ядер (^{13}C , ^{15}N , ^{125}Te , ^{111}Cd , ^{77}Se и т.д.); варьирование температуры как растворов, так и твердых образцов (CP/MAS). Исследования включают в себя многомерные, многоквантовые, динамические, селективные эксперименты спектроскопии ЯМР.

Используемые методики

- Методика регистрации ^1H ЯМР спектров
- Методика регистрации ^{13}C ЯМР спектров
- Методика регистрации ^{15}N ЯМР спектров
- Методика регистрации ^{111}Cd ЯМР спектров
- Методика регистрации ^{77}Se ЯМР спектров
- Методика регистрации ^{125}Te ЯМР спектров
- Методика регистрации двумерных HSQC ЯМР спектров
- Методика регистрации двумерных HMBSC ЯМР спектров
- Методика регистрации двумерных COSY ЯМР спектров
- Методика регистрации двумерных NOESY, EXSY ЯМР спектров

Перечень услуг

- Идентификация химической структуры органических соединений методом спектроскопии ЯМР.
- Определение чистоты соединений методом спектроскопии ЯМР.
- Регистрация спектров ЯМР всех возможных ЯМР-активных ядер, варьирование температуры растворов.
- Исследование динамических процессов многомерной спектроскопии ЯМР.

ЛАБОРАТОРИЯ ЭПР

- руководитель:

Ивахненко Евгений Петрович, д.х.н., профессор.

- персонал:

Князев Павел Анатольевич, научный сотрудник.

Спектрометр ЭПР EMXplus – 10/12 фирмы “Bruker”(Германия) 2008 г.



Исследование строения и свойств свободнорадикальных и координационных соединений.

Используемая методика:

- Проведение съемки спектров ЭПР медных и кобальтовых металлокомплексов в вакуумированных ампулах (в анаэробных условиях) в стационарном режиме измерений.

Перечень услуг:

- Проведение съемки спектров ЭПР растворов медных и кобальтовых азометиновых металлокомплексов в вакуумированных ампулах (в анаэробных условиях) в стационарном режиме измерений.
- Проведение съемки спектров ЭПР свободных феноксильных радикалов в растворе в вакуумированных ампулах (в анаэробных условиях) в стационарном режиме измерений

МЕЖДУНАРОДНЫЙ ЦЕНТР МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

Казанский (Приволжский) федеральный университет

Основные направления:

- ЯМР спектроскопия высокого разрешения
- Градиентный ЯМР и микротомография
- Мультиядерный магнитный резонанс при сверхнизких температурах
- Электронный парамагнитный резонанс
- Магнитно-резонансная томография

КЛЮЧЕВЫЕ ПЕРСОНЫ МЦМР



Аганов Альберт Варганович, Руководитель центра, зав каф. медицинской физики института физики КФУ, д.х.н., профессор.

ЯМР спектроскопия высокого разрешения, ЭПР спектроскопия

Область научных интересов: динамический ЯМР молекул и систем биомедицинского назначения, ЭПР материалов для солнечных батарей.

Albert.Aganov@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 233 74 56



Клочков Владимир Васильевич, в.н.с., зав. лабораторией ЯМР спектроскопии института физики КФУ, д.х.н., профессор кафедры медицинской физики Института физики.

ЯМР спектроскопия высокого разрешения

Область научных интересов: ЯМР спектроскопия высокого разрешения биомолекул, динамический ЯМР молекул и систем биомедицинского назначения.

Vladimir.Klochkov@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 233 74 57



Скирда Владимир Дмитриевич, зав. каф. физики молекулярных систем Института физики КФУ, д.ф.-м.н., профессор.

Градиентный ЯМР и микротомография

Область научных интересов: спектроскопия ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля.

Vladimir.Skirda@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 231 51 89



Тагиров Мурат Салихович, зав. каф. квантовой электроники и радиоспектроскопии института физики КФУ, д.ф.-м.н., профессор.

Мультиядерный магнитный резонанс при низких температурах

Область научных интересов: магнитная сверхтекучесть и нелинейный магнитный резонанс, мультиядерный магнитный резонанс при низких и сверхнизких температурах, ЯМР ^3He , магнитный резонанс в наноразмерных системах.

Murat.Tagirov@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 233 73 55



Орлинский Сергей Борисович, доцент каф. квантовой электроники и радиоспектроскопии института физики КФУ, к.ф.-м.н., доцент.

Электронный парамагнитный резонанс

Sergei.Orlinskii@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 292 64 80



Ильясов Камил Ахатович, профессор каф. Медицинской физики КФУ, д.ф.-м.н., профессор.

Магнитно-резонансная томография

Kamil.Plyasov@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 231 51 94

ПОДРАЗДЕЛЕНИЯ МЦМР

ЯМР спектроскопия высокого разрешения



Каратаева Фарида Хайдаровна, профессор каф. органической химии химического института им. А.М. Бутлерова КФУ, д.х.н., профессор.

Область научных интересов: ЯМР в органической и элементарорганической химии.

Farida.Karataeva@kpfu.ru



Аминова Роза Мухаметовна, профессор каф. химической физики Института физики КФУ, д.ф.-м.н., профессор.

Область научных интересов: квантово-химические расчеты ЯМР спектральных параметров, структуры молекул и путей реакций.

raminova@rambler.ru, телефон (раб.): +7 843 231 51 94



Юльметов Айдар Рафаилович, доцент каф. медицинской физики Института физики КФУ, к.ф.-м.н.

Область научных интересов: ЯМР спектроскопия высокого разрешения, ЯМР твердого тела.

Ajdar.Julmetov@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 233 70 12



Хайрутдинов Булат Имамудинович, с.н.с. лаборатории биофизической химии наносистем Казанского института биохимии и биофизики КазНЦ РАН, с.н.с. НИЛ ЯМР-Структура, ассистент каф. медицинской физики Института физики КФУ, к.ф.-м.н.

Область научных интересов: ЯМР спектроскопия высокого разрешения.

khayrutdinov@yahoo.com, телефон (раб.): +7 843 231 90 36



Усачев Константин Сергеевич, доцент каф. медицинской физики Института физики КФУ, к.ф.-м.н.

Область научных интересов: ЯМР спектроскопия биомолекул, структурная биология, белок-лигандные взаимодействия, ЯМР гликанов.

k.usachev@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 233 76 01



Галиуллина Лейсан Фаритовна, с.н.с. НИЛ ЯМР-структура, доцент каф. медицинской физики Института физики КФУ, к.ф.-м.н.

Область научных интересов: ЯМР спектроскопия высокого разрешения молекул и систем биомедицинского назначения

Lejsan.Galiullina@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 233 70 12



Ефимов Сергей Владимирович, главный инженер ФЦКП «Физико-химических исследований веществ и материалов» КФУ, с.н.с. НИЛ ЯМР-структура института физики, к.ф.-м.н.

Область научных интересов: ЯМР спектроскопия высокого разрешения, в том числе молекул и систем биомедицинского назначения.

Sergej.Efimov@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 233 70 12



Блохин Дмитрий Сергеевич, с.н.с. НИЛ ЯМР-структура института физики, к.ф.-м.н., ассистент каф. медицинской физики Института физики КФУ.

Область научных интересов: ЯМР спектроскопия высокого разрешения биомолекул.

Dmitrij.Blohin@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 233 70 12



Фаткуллин Наиль Фидаиевич, профессор каф. физики молекулярных систем института физики КФУ, д.ф.-м.н., профессор.
Область научных интересов: теория, ЯМР релаксация, динамика полимерных систем.
Nail.Fatkullin@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 231 51 89



Филиппов Андрей Васильевич, профессор каф. физики молекулярных систем института физики КФУ, д.ф.-м.н., доцент.
Область научных интересов: самодиффузия в биомембранах; ионных жидкостях вблизи поверхности и в ограниченном объеме.
Andrey.Filippov@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 231 51 89



Халиуллина Алия Владимировна, с.н.с. научной лаборатории ядерного магнитного резонанса института физики КФУ, к.ф.-м.н.
Область научных интересов: ЯМР белков в растворах и биомембранах, моделирование взаимодействия молекул с биомембранами.
Aliya.Khaliullina@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 233 71 89



Гизатуллин Булат Ильдарович, ассистент каф. физики молекулярных систем ИФ К(П)ФУ, к.ф.-м.н.
Область научных интересов: ЯМР, релаксация, самодиффузия, пористые среды.
bulat_giz@mail.ru, телефон (раб.): +7 843 233 71 89



Архипов Руслан Викторович, инженер кафедры физики молекулярных систем ИФ К(П)ФУ, к.ф.-м.н.
Область научных интересов: ЯМР, релаксация, самодиффузия, потоки, пористые среды.
general_zh@mail.ru, телефон (раб.): +7 843 233 71 89



Александров Артем Сергеевич, ассистент кафедры физики молекулярных систем ИФ К(П)ФУ.
Область научных интересов: ЯМР, ЯМР в Ван-Флековских парамагнетиках, ЯМР каротаж.
Alexandrov.Artem.Sergeevich@gmail.com, телефон (раб.): +7 843 233 71 89



Дорогиницкий Михаил Михайлович, инженер НОЦ «Современные геофизические технологии».
Область научных интересов: стохастическое движение молекул, ЯМР-томография, ЯМР каротаж.
m_dorogin@bk.ru, телефон (раб.): +7 9173920408



Савинков Андрей Владимирович, доцент каф. физики молекулярных систем ИФ К(П)ФУ, к.ф.-м.н.
Область научных интересов: ионные кристаллы и их магнитные свойства, ЯМР, ЯМР в Ван-Флековских парамагнетиках.
Andrey.Savinkov@gmail.com, телефон (раб.): +7 9178865758



Иванов Анатолий Александрович, электроник кафедры физики молекулярных систем ИФ К(П)ФУ.
Область научных интересов: ЯМР, газовые гидраты, метаногидраты.
Anatoly.Ivanov@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 231 51 89



Гнездилов Олег Иванович, главный инженер проекта ФЦКП «Физико-химические исследования веществ и материалов» К(П)ФУ, к.ф.-м.н.
Область научных интересов: ЯМР ВР, ЯМР с ВМУ, ЯМР-диффузометрия в растворах, микрофотография ЯМР.
goi@yandex.ru, телефон (раб.): +7 843 233 71 89

Мультиядерный магнитный резонанс при низких температурах



Еремин Михаил Васильевич, профессор каф. квантовой электроники и радиоспектроскопии института физики КФУ, д.ф.-м.н., профессор.
Область научных интересов: Магнитные свойства соединений с незаполненными 3d- и 4f-оболочками. Взаимодействия спиновых и орбитальных моментов. Взаимосвязь магнетизма и сверхпроводимости в ВТСП.
Mikhail.Eremin@kpfu.ru, телефон (раб.): +7 843 231 51 16



Дуглав Александр Васильевич, доцент каф. квантовой электроники и радиоспектроскопии института физики КФУ, к.ф.-м.н.
Область научных интересов: ЯМР и ЯКР в ВТСП и минералах при низких и сверхнизких температурах.
Alexander.Dooglav@kpfu.ru, Телефон (раб.): +7 843 231 51 75



Егоров Александр Васильевич, доцент каф. квантовой электроники и радиоспектроскопии Института физики КФУ, к.ф.-м.н.
Область научных интересов: ЯМР в ван-флековских парамагнетиках, ЯМР ^3He , ЯМР/ЯКР в ВТСП, ядерная магнитная релаксация в кристаллах.
Alexander.Egorov@kpfu.ru, Телефон (раб.): +7 843 231 51 75



Мухамедшин Ирек Рафкатович, доцент каф. общей физики, к.ф.-м.н., доцент.
Область научных интересов: твердотельный ЯМР, сильнокоррелированные электронные системы, физика низких температур.
Irek.Mukhamedshin@kpfu.ru, Телефон (раб.): +7 843 233 71 75



Клочков Александр Владимирович, доцент каф. квантовой электроники и радиоспектроскопии Института физики КФУ, к.ф.-м.н.
Область научных интересов: ЯМР ^3He , ЯМР в наноразмерных системах при низких температурах, ЯМР материалов, магнитная сверхтекучесть и нелинейный магнитный резонанс.
Alexander.Klochkov@kpfu.ru, Телефон (раб.): +7 843 233 76 63



Алакшин Егор Михайлович, н.с. НИЛ Магнитная сверхтекучесть и нелинейный магнитный резонанс, ассистент каф. квантовой электроники и радиоспектроскопии Института физики КФУ, к.ф.-м.н.
Область научных интересов: ЯМР ^3He , ЯМР в наноразмерных системах при низких температурах, магнитная сверхтекучесть и нелинейный магнитный резонанс.
Egor.Alakshin@kpfu.ru, Телефон (раб.): +7 843 233 76 63



Сафиуллин Каюм Рафаилович, н.с. НИЛ Магнитная сверхтекучесть и нелинейный магнитный резонанс Института физики КФУ, к.ф.-м.н.
Область научных интересов: ЯМР, ^3He , низкие температуры, ЯМР в наноразмерных системах, магнитная сверхтекучесть и нелинейный магнитный резонанс.
kajum@inbox.ru, Телефон (раб.): +7 843 233 73 06



Романова Ирина Владимировна, ассистент каф. общей физики Института физики КФУ, к.ф.-м.н.
Область научных интересов: ЯМР в наноразмерных системах при низких температурах, ЯМР и магнитоупругие свойства фторидов редких земель.
Irina.Choustova@kpfu.ru, Телефон (раб.): +7 843 233 76 63



Кузьмин Вячеслав Владимирович, м.н.с. НИЛ Магнитная сверхтекучесть и нелинейный магнитный резонанс, к.ф.-м.н.

Область научных интересов: ЯМР ^3He , ЯМР в наноразмерных системах при низких температурах, магнитная сверхтекучесть и нелинейный магнитный резонанс, ЯМР в низких полях.

Slava625@yandex.ru, Телефон (раб.): +7 843 233 76 63



Газизулин Расул Рамилевич, м.н.с. НИЛ Магнитная сверхтекучесть и нелинейный магнитный резонанс, к.ф.-м.н.

Область научных интересов: ЯМР ^3He , ЯМР в наноразмерных системах при низких температурах, магнитная сверхтекучесть и нелинейный магнитный резонанс.

g-rasul@yandex.ru, Телефон (раб.): +7 843 233 76 63

Электронный парамагнитный резонанс



Гафуров Марат Ревгеревич, доцент кафедры медицинской физики института физики КФУ, к.ф.-м.н.

Область научных интересов: ЭПР кристаллов, наноматериалов, биорелевантных и биогенных объектов, динамическая поляризация ядер.

Marat.Gafurov@kpfu.ru, Телефон (раб.): + 7 843 2926480



Мамин Георгий Владимирович, доцент каф. квантовой электроники и магнитной радиоспектроскопии института физики КФУ, к.ф.-м.н., Ph.D.

Область научных интересов: разработка и применение техник магнитного резонанса для исследования широкого класса веществ в твердом и жидком состояниях, импульсный ЭПР, двойной электрон-ядерный резонанс.

Georgiy.Mamin@kpfu.ru, Телефон (раб.): + 7 843 2926480



Юсупов Роман Валерьевич, доцент каф. квантовой электроники и магнитной радиоспектроскопии института физики КФУ, с.н.с. Центра квантовых технологий КФУ, к.ф.-м.н.

Область научных интересов: фотоиндуцированный ЭПР, оптико-электронные явления.

Roman.Yusupov@kpfu.ru, Телефон (раб.): + 7 843 2337327



Зверев Дмитрий Германович, главный инженер Федеральный центр коллективного пользования физико-химических исследований веществ и материалов Приволжского Федерального округа, к.ф.-м.н., Ph.D.

Область научных интересов: электроиндуцированный ЭПР, динамическая поляризация ядер.

Dmitrii.Zverev@kpfu.ru, Телефон (раб.): + 7 843 2337327



Родионов Александр Александрович электроник каф. квантовой электроники и магнитной радиоспектроскопии института физики КФУ, м.н.с. международного центра магнитного резонанса КФУ.

Область научных интересов: ЭПР биогенных и биорелевантных объектов при высоких. комнатных и сверхнизких температурах.

Alexander. Rodionov@kpfu.ru, телефон (раб.): + 7 843 2337327

МЕСТОПОЛОЖЕНИЕ:

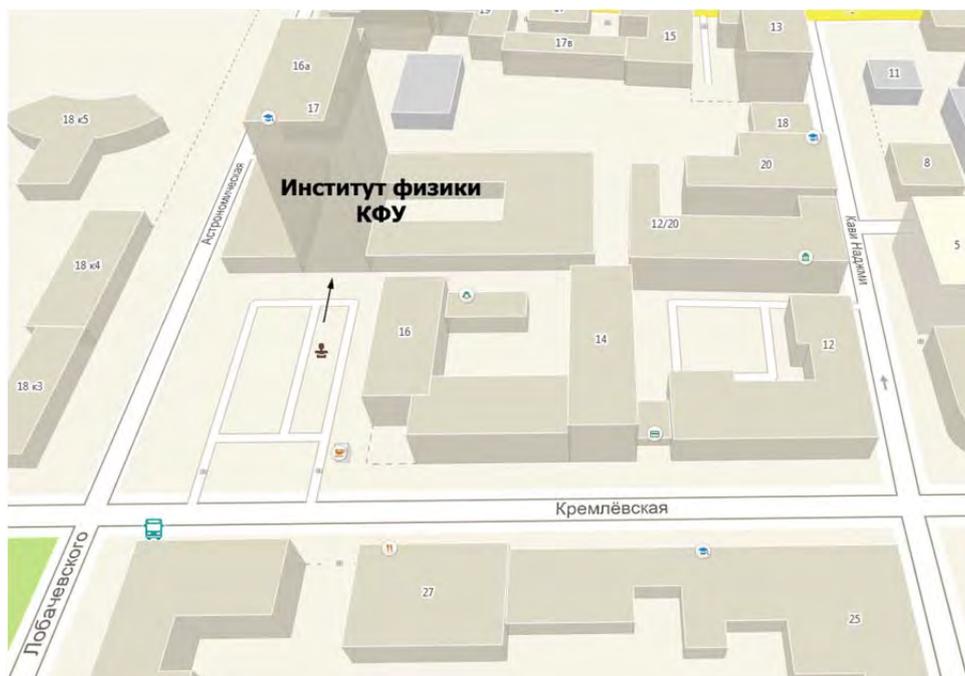
Почтовый адрес:

ФГАОУ ВПО "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Институт физики, Международный центр магнитного резонанса

ул. Кремлевская, д. 16а

420008 Казань, Россия



ТЕЛЕФОНЫ

Комната	Назначение	Телефон	Местный телефон
Кремлевская д.16а ком. 102	директор центра, зав. каф. мед. физики	+7 843 233 74 56	74-56
Кремлевская д.16а ком. 204	каф. физики молекулярных систем	+7 843 231 51 89	51-89
Кремлевская д.16а ком. 103	научная лаборатория ЯМР высокого разрешения	+7 843 233 74 57	74-57
ком. 104		+7 843 233 70 12	70-12
ком. 106		+7 843 233 76 01	76-01
Кремлевская д.18 ком. 166	спектроскопия ЭПР	+ 7 843 2337327	76-03
ком. 249		+ 7 843 2926480	73-27
Кремлевская д.18 ком. 172	зав.каф. квантовой электроники и радиоспектроскопии	+7 843 233 73 55	73-55

ПРИНЦИПЫ РАБОТЫ

МЦМР КФУ дает возможность использования оборудования, инфраструктуры, а также привлечения высокопрофессиональных сотрудников, имеющих опыт работы в зарубежных научных центрах магнитного резонанса, для выполнения и сопровождения исследований, в том числе комплексных, в фундаментальных, прикладных и инновационных проектах, работах по заказам предприятий реальных секторов экономики практически по всему спектру существующих методов и методик магнитного резонанса (ЯМР, ЭПР, МРТ). Лаборатории МЦМР включены в систему Федерального Центра Коллективного Пользования КФУ «Физико-химические исследования веществ и материалов» (ФЦКП «ФХИ»), на сайте которого (<http://kpfu.ru/science/centry-kollektivnogo-dostupa/federalnyj-centr-kollektivnogo-polzovaniya/metodicheskoe-obespechenie>) размещена информация об оказании услуг внешним организациям (исследования и измерения). Мы открыты для сотрудничества с учреждениями любого профиля и формы собственности. Совместные измерения, исследования и разработки, ориентированные на публикацию результатов в реферируемых журналах, проводятся безвозмездно только при условии заключения договора о сотрудничестве с КФУ и при указании аффилиции авторов от КФУ. В лабораториях МЦМР можно также пройти курсы начальной подготовки или переподготовки специалистов по стандартным или индивидуальным программам переподготовки с выдачей сертификата.

Приезжим предоставляется рабочее место и комната в общежитии (оплата проживания из средств пользователя).

ПУБЛИКАЦИИ 2014-ГО ГОДА

1. Khodov, I.A. Inversion of population distribution of Felodipine conformations at increased concentration in dimethyl sulfoxide is a prerequisite to crystal nucleation / I.A. Khodov, S.V. Efimov, M.Yu. Nikiforov, V.V. Klochkov, N. Georgi // J. Pharm. Sci. – 2014. – Vol. 103, No. 2. – P. 392–394.
2. Khodov, I.A. Inversion of population distribution of felodipine conformations at increased concentration in dimethyl sulfoxide is a prerequisite to crystal nucleation / I.A. Khodov, S.V. Efimov, M.Yu. Nikiforov, V.V. Klochkov, N. Georgi // J. Pharm. Sci.- 2014. - Vol. 103, No. 5. - P. 1582. (Corrigendum)
3. Khodov, I.A. Determination of preferred conformations of ibuprofen in chloroform by 2D NOE spectroscopy / I.A. Khodov, S.V. Efimov, V.V. Klochkov, G.A. Alper, L.A.E. Batista de Carvalho // European Journal of Pharmaceutical Sciences. – 2014. – Vol. 65. – P. 65–73.
4. Kuznetsov, I.V. Reaction of (+)-carvone with several hetarylsulfonyl chlorides and pyridylselenyl chloride / I.V. Kuznetsov, V.A. Startseva, L.E. Nikitina, V.K. Osmanov, A.V. Borisov, Zh.V. Matsulevich, V.V. Klochkov // Chemistry of Natural Compounds. - 2014. -Vol. 50, No. 2. - P. 276–280.
5. Startseva, V. A. Synthesis of new pinane-type hetarylsulfides / V. A. Startseva, A. V. Bodrov, A. V. Arefev, I.V. Kuznetsov, O.A. Lodochnikova, V.V. Klochkov, L.E. Nikitina // Chemistry of Natural Compounds. - 2014. -Vol. 50, No. 4. - P. 652–657.
6. Blokhin, D.S. Spatial structure of oligopeptide PAP(248-261), the N-terminal fragment of the HIV enhancer prostatic acid phosphatase peptide PAP(248-286), in aqueous and SDS micelle solutions / D.S. Blokhin, A.V. Filippov, O.N. Antzutkin, F.K. Karataeva, V.V. Klochkov // J. Molecular Structure. -2014. - V.1070. - P.38–42.
7. Blokhin, D.S. NOE effect of sodium dodecyl sulfate in monomeric and micellar systems by NMR spectroscopy / D.S. Blokhin, E.A. Filippova, V.V. Klochkov // Applied Magnetic Resonance – 2014 – Vol. 45, I. 8. - P. 715–721.
8. Усачев, К.С. Структура амилоидогенных β -пептидов в комплексе с модельными мембранами / Усачев, К.С., Филиппов А.В., Клочков В.В. // Цитология. - 2014. - Т. 56, N 6 - С. 453–455.
9. Usachev, K.S. NMR structure of the arctic mutation of the alzheimer's A β (1-40) peptide docked to SDS micelles / K.S. Usachev, A.V. Filippov, B.I. Khairutdinov, O.N. Antzutkin, V.V. Klochkov // Journal of Molecular Structure – 2014. – V.1076. – P.518–523.
10. Aganova, O. The study of the conformation and dynamics of the new quaternary phosphonium salts by NMR spectroscopy / O. Aganova, L. Galiullina, A. Aganov, Yu. Shtyrilin, M. Pugachev, N. Shtyrilin, V. Klochkov // Applied Magnetic Resonance. – 2014. – Vol. 45, No.7. – P. 653–665.
11. Konkin, A. Improvement of P3HT-ICBA solar cell photovoltaic characteristics due to the incorporation of the maleic anhydride additive: P3HT morphology study of P3HT-ICBA and P3HT-ICBA-MA films by means of X-band LESR /

- Konkin A., Ritter U., Scharff P., Schrödner M., Sensfuss S., Aganov A.V., Klochkov V., Ecke G. / *Synthetic Metals*. - 2014. - Vol. 197. - P. 210–216.
12. Efimov, S. Observation of conformational exchange in cyclosporin in media of varying polarity by NMR spectroscopy / S. Efimov, Yu. Zgzdzay, V. Klochkov // *Appl. Magn. Reson.* – 2014. – Vol. 45. – P. 1225–1235.
 13. Rakhmatullin, I.Z. Dynamic NMR study of cyclic derivatives of pyridoxine / I.Z. Rakhmatullin, L.F. Galiullina, M.R. Garipov, A.D. Strel'nik, Y.G. Shtyrlin, V.V. Klochkov // *Magnetic Resonance in Chemistry*. – 2014. – Vol. 52, N 12. - P. 769–778.
 14. Irisova I.A. A study of mechanochemical doping of fluoride crystals with a fluorite structure by Er³⁺ ions via electron paramagnetic resonance spectra / I. A. Irisova, A. A. Rodionov, D. A. Tayurskii, R. V. Yusupov // *Optics and Spectroscopy*. — 2014. — Vol. 116. — №5. — P. 783–789.
 15. Baibekov, E. I. Broadening of paramagnetic resonance lines by charged point defects in neodymium-doped scheelites. / E. I. Baibekov, D. G. Zverev, I. N. Kurkin, A. A. Rodionov, B. Z. Malkin, B. Barbara // *Optics and Spectroscopy*. -2014. - V. 116(5). -P.661–666.
 16. Zverev, D. G. The Transition from Dynamics to Statics in the Electron-Spin-Resonance Spectra of Impurity Mn²⁺ Ions in Strontium Titanate / D. G. Zverev, R. V. Yusupov, A. A. Rodionov, O. E. Kvyatkovskii, L. Jastrabik, A. Dejneka, V.A. Trepakov // *Optics and Spectroscopy*. -2014. -V. 116. -N. 6. -P. 818–822.
 17. Baibekov, E. I. Coherent manipulation of dipolar coupled spins in an anisotropic environment / E. I. Baibekov, M. R. Gafurov, D. G. Zverev, I. N. Kurkin, B. Z. Malkin, B. Barbara // *Phys. Rev. B*.-2014. -V.90. -P. 174402.
 18. Kratochvílová, I. Magnetical and Optical Properties of Nanodiamonds Can Be Tuned by Particles Surface Chemistry: Theoretical and Experimental Study / I. Kratochvílová, J. Sebera, P. Ashcheulov, M. Golan, M. Ledvina, J. Míková, F. Mravec, A. Kovalenko, D. Zverev, B. Yavkin, S. Orlinskii, S. Zalis, A. Fiserová, J. Richter, L. Sefc, J. Turanek // *Journal of Physical Chemistry C*. -2014. -V. 118. -P.25245–25252.
 19. Mukhamedshin I.R. Evolution of Co charge disproportionation with Na order in Na_xCoO₂ / Mukhamedshin I.R., Dooglav A.V., Krivenko S.A., Alloul H. // *Physical Review B, APS*. – 2014. – v. 90. – pp. 115151-1-115151–11.
 20. Mukhamedshin, I.R. Complex magnetic differentiation of cobalts in Na_xCoO₂ with 22 K Néel temperature / I.R. Mukhamedshin, I.F. Gilmutdinov, M.A. Salosin, H. Alloul // *Письма в ЖЭТФ* -т.99. -2014. – стр. 542–546.
 21. Khairutdinov B., Supramolecular complex formed by DNA oligonucleotide and thiacalix[4]arene. NMR-spectroscopy and molecular docking / Bulat Khayrutdinov, Elena Ermakova, Aleksandr Sitnitsky, Ivan Stoikov, Yuriy Zuev // *Journal of Molecular Structure*. – 2014. Vol. 1074, – P. 126–133.
 22. Mostovaya O.A., Phosphorylated amino derivatives of thiacalix[4]arene as membrane carriers: synthesis and host-guest molecular recognition of amino, hydroxy and dicarboxylic acids / Olga A. Mostovaya, Maria N. Agafonova, Andrey V. Galukhin, Bulat I. Khayrutdinov, Daut Islamov, Olga N. Kataeva, Igor S. Antipin, Alexander I. Konovalov and Ivan I. Stoikov // *Journal of Physical Organic Chemistry*. – 2014. Vol. 27, – P. 57–65.
 23. Konkin, A. Multifrequency X,W-band ESR study on photo-induced ion radical formation in solid films of mono- and di-fullerenes embedded in conjugated polymer/ A. Konkin, U. Ritter, P. Scharff, G. Mamin, A. Aganov, S. Orlinskii, V. Krinichnyi, D.A.M. Egbe, G. Ecke, H. Romanus // *Carbon*.-2014.- V.77.-P. 11–17.
 24. Батуев, Е.А. Методы ЯМР скрининга в поиске потенциальных ингибиторов *Citrobacter freundii* метионин γ-лиазы / Е.А. Батуев, А.Ю. Лизунов, Е.А. Морозова, В.В. Клочков, Н.В. Ануфриева, Т.В. Демидкина, В.И. Польшаков // *Молекулярная Биология* – 2014 – N 6.
 25. Бодров, А. В. (+)- Камфен в реакциях с дитиолами / А. В. Бодров, В. А. Старцева, Р. З. Мусин, О. А. Лодочникова, В. В. Клочков, А. С. Галстян, Л. Е. Никитина // *Химия природных соединений*.-2014. - Т. 50, N. 6.
 26. Usachev, K.S. High-resolution NMR structure of the antimicrobial peptide protegrin-2 in the presence of DPC micelles / K.S. Usachev, A.V. Filippov, O.V. Kolosova, V.V. Klochkov // *Journal of Biomolecular NMR*.-2014.– DOI:10.1007/s10858-014-9885-4.
 27. Galiullina, L.F. Structure of pravastatin and its complex with sodium dodecyl sulfate micelles studied by NMR spectroscopy / L.F. Galiullina, I.Z. Rakhmatullin, E.A. Klochkova, A.V. Aganov, V.V. Klochkov // *Magnetic resonance in chemistry*. – 2014. – Vol. 52. DOI: 10.1002/mrc.4146.
 28. Mukhamedshin, I.R. Na order and Co charge disproportionation in Na_xCoO₂ / Mukhamedshin I.R., Alloul H. // *Physica B: Physics of Condensed Matter*. -2014. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2014.11.040>.
 29. Hofmann, M. Field-cycling NMR relaxometry probing the microscopic dynamics in polymer melts [Text] / M. Hofmann, B. Kresse, A. Privalov, L. Willner, N. Fatkullin, F. Fujara, E. Roessler // *Macromolecules*. – 2014. – V.47 (22). – P. 7917–7929.
 30. Fatkullin, N. Proton spin dynamics in polymer melts: new perspectives for experimental investigations of polymer dynamics / N. Fatkullin, S. Stapf, M. Hofmann, R. Meier, E.A. Rössler // *J. Non-Cryst. Solids*. – 2014. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2014.07.008.
 31. Arkhipov, V.P. Micelles and Aggregates of Oxyethylated Isononylphenols, and Their Extraction Properties near Cloud Point / V.P. Arkhipov, Z.Sh. Idiyattullin, E.F. Potapova, O.N. Antzutkin, A.V. Filippov // *Journal of Physical Chemistry B*. - 2014. - V.118. - P. 5480–5487.

32. Arkhipov, V.P. Molecular self-diffusion and micellar structure in the aqueous solutions of AF9-10 ethoxylated isononylphenol near a cloud point / V.P. Arkhipov, Z.Sh. Idiyatullin, O.I.Gnezdilov, E.V. Petrova, A.V. Filippov, O.N. Antzutkin // *Mendeleev Communications*. – 2014. – V. 24. – P. 266–268.
33. Filippov, A.V. Effect of Curcumin on Lateral Diffusion of Phosphatidylcholines in Saturated and Unsaturated Bilayers / A.V. Filippov, S.A. Kotenkov, B.V. Munavirov, O.N. Antzutkin // *Langmuir*. – 2014. – V. 30. – P.10686–10690.
34. Taher, M. Halogen-free pyrrolidinium bis(mandelato)borate ionic liquids: some physicochemical properties and lubrication performance as additives to polyethylene glycol / M. Taher, F.U. Shah, A. Filippov, P. de Baets, S. Glavatskih, O.N. Antzutkin // *RSC Advances*. – 2014. – V.4. – P.30617–30623.
35. Shtyrilin, V.G. The C–H bond activation in 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate–copper(II) acetate–water–air (dioxxygen) systems / V. G. Shtyrilin, N. Yu. Serov, D. R. Islamov, A. L. Konkin, M. S. Bukharov, O.I. Gnezdilov, D. B. Krivolapov, O. N. Kataeva, G. A. Nazmutdinova and F. Wendler// *Dalton Trans.*- 2014. V.43. – P.799–805.
36. Biktagirov, T. B. Nitrogen-Containing Species in the Structure of the Synthesized Nano-Hydroxyapatite. / T. B. Biktagirov, M. R. Gafurov, G. V. Mamin, S. B. Orlinskii, B. V. Yavkin, A. A. Rodionov, E. S. Klimashina, V. I. Putlyayev, and Ya. Yu. Filippov // *Optics and Spectroscopy*. -2014. -V. 116. -N. 5. -P. 715–720
37. Gafurov, M. Nitrogen-containing species in the structure of the synthesized nano-hydroxyapatite / M.Gafurov, T.Biktagirov, B.Yavkin, G.Mamin, Y. Filippov, E.Klimashina, V.Putlayev, S.Orlinskii // *JETP Letters*. -2014. -V. 99. -N.4. -P. 196–203.
38. Biktagirov, T. Combination of EPR measurements and DFT calculations to study nitrate impurities in the carbonated nanohydroxyapatite / T. Biktagirov, M. Gafurov, G. Mamin, E. Klimashina, V. Putlayev, S. Orlinskii // *The Journal of Physical Chemistry A*. -2014. -V.118. -P.1519–1526.
39. Burlaka, A. Changes in mitochondrial functioning with electromagnetic radiation of ultra high frequency as revealed by electron paramagnetic resonance methods / A. Burlaka, M. Selyuk, M. Gafurov, S. Lukin, V. Potaskalova, E. Sidorik // *International Journal of Radiation Biology*. – 2014. -V. 90. -N. 5. –P. 357–362.
40. Aminov, L.K. EPR study of clusters of rare-earth ions in mixed fluoride crystals / L.K. Aminov, M.R. Gafurov, I.N. Kurkin, A.A. Rodionov // *Optics and Spectroscopy*. -2014. -V. 116. -N. 5. -P. 773–776.
41. Bukharov, M.S. Study of structural and dynamic characteristics of copper(II) amino acid complexes in solutions by combined EPR and NMR relaxation methods / M.S. Bukharov, V.G. Shtyrilin, A.Sh. Mukhtarov, G.V. Mamin, S. Stapf, C. Mattea, A.A. Krutikov, A.N. Il'in, N.Yu. Serov // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2014. – V. 16, N 20. – P. 9411–9421.
42. Biktagirov, T. EPR Study of Rotational Mobility of Vanadyl-Porphyrin Complexes in Crude Oil Asphaltenes: Probing the Effect of Thermal Treatment of Heavy Oils / T. Biktagirov, M. R. Gafurov, M. Volodin, G. V. Mamin, A. Rodionov, V. V. Izotov, A. Vakhin, D. Isakov, S. B. Orlinskii // *Energy & Fuels*. -2014. V.28. –N.10. –P.6683–6687.
43. Mukhambetov, I. N. Electron Paramagnetic Resonance and Electron Nuclear Double Resonance Study of the Paramagnetic Complexes of Anthraquinone on the Surface of γ -Al₂O₃ / I. N. Mukhambetov, A. A. Lamberov, B. V. Yavkin, M. R. Gafurov, G. V. Mamin, and S. B. Orlinskii // *J. Phys. Chem. C*. -2014. –V.118. –N.27. –P. 14998–15003.
44. Gafurov, M. A DFT, X- and W-band EPR and ENDOR Study of Nitrogen-Centered Species in (Nano)Hydroxyapatite / M. Gafurov, T. Biktagirov, G. Mamin, S. Orlinskii // *Applied Magnetic Resonance*. -2014. –V.45. –P.1189–1203.
45. Gazizulina, A. M. Electron Paramagnetic Resonance of Gd³⁺ Ions in Powders of LaF₃:Gd³⁺ Nanocrystals / A. M. Gazizulina, E. M. Alakshin, E. I. Baibekov, R. R. Gazizulin, M. Yu. Zakharov, A. V. Klochkov, S. L. Korableva, M. S. Tagirov // *JETP Letters*. -2014, -V. 99. -N. 3. -P. 149–152.
46. Yavkin, B. V. Defects in Nanodiamonds: Application of High-Frequency cw and Pulse EPR, ODMR / B. V. Yavkin, V. A. Soltamov, R. A. Babunts, A. N. Anisimov, P. G. Baranov, F. M. Shakhov, S. V. Kidalov, A. Ya. Vul', G. V. Mamin, S. B. Orlinskii // *Appl Magn Reson*. - 2014. – V.45. – P.1035–1049.
47. Alexandrov, A. S. The fow-field pulsed mode dynamic nuclear polarization in the pentavalent chromium complex and crude oils / A. S. Alexandrov, R. V. Archipov, A. A. Ivanov, O. I. Gnezdilov, M. R. Gafurov, V. D. Skirda // *Appl Magn Reson*. -2014. –V.45. – P.1275–1287.
48. Burlaka, A. P. Superoxide- and NO-dependent mechanisms of the reprogramming of bone marrow cells by tumor cells / A. P. Burlaka, I. I. Ganusevich, S. N. Lukin, M. R. Gafurov, E. P. Sidorik // *Appl Magn Reson*. -2014. –V.45. – P.1261–1273
49. Aminov, L. K. Study of the structures of the tetragonal paramagnetic centers in the mixed fluorite crystals with rare-earth Ions by EPR / L. K. Aminov, M. R. Gafurov, I. N. Kurkin, A. A. Rodionov // *Appl Magn Reson* -2014. –V.45. – P.1147–1156.
50. Nikolaev, S. I. Poly(ϵ -Caprolactone) nerve conduit and local delivery of vegf and fgf2 genes stimulate neuroregeneration / S. I. Nikolaev, A. R. Gallyamov, G. V. Mamin, Yu. A. Chelyshev // *Bulletin of Experimental Biology and Medicine*. – 2014. – V. 157. – N. 1. – p. 155–158.
51. Tagirov, M. S. Magnon BEC in Antiferromagnets with Suhr–Nakamura Interaction [text] / M. S. Tagirov, E. M. Alakshin, Yu. M. Bunkov, R. R. Gazizulin, A. M. Gazizulina, L. I. Isaenko, A. V. Klochkov, T. R. Safin, K. R. Safullin, S. A. Zhurkov // *Journal of Low Temperature Physics*. – 2014. – V.175. – N.1-2. – P. 167–176.

52. Bunkov, Yu. M. Observation of Majorana Quasiparticles' Edge States in Superfluid ^3He / Yu. M. Bunkov, R. R. Gazizulin // *Applied Magnetic Resonance*. – 2014. – V. 45. – P.1219–1224.
53. Еремин, М. В. Динамическая зарядовая восприимчивость и смягчение продольных фононных мод в купратах / М. В. Еремин, М. А. Малахов // *Письма в ЖЭТФ*. – 2014. – Т. 100. – Вып. 5. – С. 362–365.
54. Schaile, S. ESR evidence for partial melting of the orbital order in LaMnO_3 below the Jahn-Teller transition / S. Schaile, H.-A. Krug von Nidda, J. Deisenhofer, M. V. Eremin, Y. Tokura, A. Loidl // *Phys. Rev B*. – 2014. – V. 54. – P. 154424.
55. Alakshin, E.M. Annealing of PrF_3 Nanoparticles by Microwave Irradiation [text] / E.M.Alakshin, R.R.Gazizulin, A.V.Klochkov, S.L.Korableva, T.R.Safin, K.R.Safiullin and M.S.Tagirov // *Optics and Spectroscopy*. – 2014. – V.116.,I.5. – P.721–723.
56. Bukharov, M.S. Study of structural and dynamic characteristics of copper(II) amino acid complexes in solutions by combined EPR and NMR relaxation methods [Text] / M.S. Bukharov, V.G. Shtyrin, A.Sh. Mukhtarov, G.V. Mamin, S. Stapf, C. Mattea, A.A. Krutikov, A.N. Il'in, N.Yu. Serov // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2014. – V. 16, N 20. – P. 9411–9421.
57. Karataeva, F.Kh. Structure and intramolecular flexibility of N-(thio)phosphoryl(thio)amides: XVIII. Structure of N-phenyl,N'-(diisopropoxythiophosphoryl)thiourea [Text] / F.Kh. Karataeva, A.A. Baltaev, F.D. Sokolov // *Russian J of Gen.Chem.* – 2014. – Vol. 84, No. 11. – P. 2142–2146.
58. Khairutdinov, B. Supramolecular complex formed by DNA oligonucleotide and thiacalix[4]arene. NMR-spectroscopy and molecular docking / B.Khairutdinov, E.Ermakova, A.Sitnitsky, I.Stoikov, Y.Zuev // *J. Molecular Structure*. – 2014. – V.1074. – P. 126–133.
59. Mostovaya, O.A. Phosphorylated amino derivatives of thiacalix[4]arene as membrane carriers: Synthesis and host-guest molecular recognition of amino, hydroxy and dicarboxylic acids / O.A.Mostovaya, M.N.Agafonova, A.V.Galukhin, B.I.Khayrutdinov, D.Islamov, O.N.Kataeva, I.S.Antipin, I.I.Stoikov // *Journal of Physical Organic Chemistry*. – 2014. – V. 27. – №1. – P. 57–65.
60. Muravev, A.A. Synthesis and fluorescent properties of thiacalix[4]arenes containing terpyridyl fragments at the lower rim [Text] / Muravev, A.A., Burilov, V.A., Solov'eva, S.E., Strel'nik, A.G., Latypov, S.K., Bazanova, O.B., Sharafutdinova, D.R., Antipin, I.S. & Konovalov, A.I. // *Russian Chemical Bulletin*. – 2014. – v. 63. – pp. 214–222.
61. Pupilampu, J.B. Synthesis of p-tert-butylthiacalix[4]arenes functionalized with tris(2-aminoethyl)amine fragments at the lower rim and their interaction with model lipid membranes / J.B.Pupilampu, L.S.Yakimova, A.A.Vavilova, D.A. Fayzullin, Y.F.Zuev, I.I.Stoikova // *Macroheterocycles*. – 2014. –V.7. – № 3. – P. 227–233.

НЕКОТОРЫЕ ПУБЛИКАЦИИ 2015-ГО ГОДА

- Galiullina, L.F. Structure of pravastatin and its complex with sodium dodecyl sulfate micelles studied by NMR spectroscopy / L.F. Galiullina, I.Z. Rakhmatullin, E.A. Klochkova, A.V. Aganov, V.V. Klochkov // *Magnetic Resonance in Chemistry*, 2015, V. 53, 2, 110-114. - DOI: 10.1002/mrc.4146.
- Usachev K.S. Antimicrobial peptide protegrin-3 adopt an antiparallel dimer in the presence of DPC micelles. A high-resolution NMR study / K.S. Usachev, S.V. Efimov, O.A. Kolosova, E.A. Klochkova, A.V. Aganov // *Journal of Biomolecular NMR*. – 2015. – V.62. – P. 71-79. DOI: 10.1007/s10858-015-9920-0.
- Galiullina, L.F. Structure of pravastatin and its complex with sodium dodecyl sulfate micelles studied by NMR spectroscopy / L.F. Galiullina, I.Z. Rakhmatullin, E.A. Klochkova, A.V. Aganov, V.V. Klochkov // *Magnetic Resonance in Chemistry*, 2015, V. 53, 2, 110-114. - DOI: 10.1002/mrc.4146.
- Usachev K.S. Antimicrobial peptide protegrin-3 adopt an antiparallel dimer in the presence of DPC micelles. A high-resolution NMR study / K.S. Usachev, S.V. Efimov, O.A. Kolosova, E.A. Klochkova, A.V. Aganov // *Journal of Biomolecular NMR*. – 2015. – V.62. – P. 71-79. DOI: 10.1007/s10858-015-9920-0.
- Ziganshin, A.M., Ziganshina, E.E., Byrne, J., Gerlach, R., Struve, E., Biktagirov, T., Rodionov, A., Kappler, A. Fe(III) mineral reduction followed by partial dissolution and reactive oxygen species generation during 2,4,6-trinitrotoluene transformation by the aerobic yeast *Yarrowia lipolytica* (2015) *AMB Express*, 5 (1), pp. 1–12.
- Способ определения фактора насыщения электронных переходов парамагнитной подсистемы в веществе." Патент на изобретение RU 2547899 Дата начала отсчета срока действия патента: 19.11.2013. Опубликовано: 10.04.2015 Бюл. № 10. Автор: М.Р. Гафуров. Патентообладатели: ФГАОУ ВПО КФУ, ООО "ТНГ-Групп".
- Filippov A. / Self-diffusion and interactions in mixtures of imidazolium bis(nandelato)borate ionic liquids with poly(ethylene glycol): ^1H NMR study/ N. Azancheev, M. Taher, F. U. Shah, P. Rabet, S. Glavatskih, O. N. Antzutkin // *Magnetic Resonance in Chemistry*.- 2015.
- Ziganshin, A.M. Fe(III) mineral reduction followed by partial dissolution and reactive oxygen species generation during 2,4,6-trinitrotoluene transformation by the aerobic yeast *Yarrowia lipolytica* / A. M. Ziganshin, E. E. Ziganshina, J. Byrne, R. Gerlach, E. Struve, T. Biktagirov, A. Rodionov, A. Kappler // *AMB Express*. – 2015. –V.5 –P. 8.

- Irisova, I. Structure and Metastability of MF₂ (M=Ca, Sr, Ba) Fine Powders Mechanochemically Doped with Er³⁺ Ions / I. Irisova, A. Kiiamov, S. Korableva, A. Rodionov, D. Tayurskii, R. Yusupov // *Appl. Magn. Reson.* - 2015. - V. 46. - P. 515–522.
- Alakshin, E.M. The influence of restricted geometry of diamagnetic nanoporous media on ³He relaxation / E. M. Alakshin, R. R. Gazizulin, M. Yu. Zakharov, A. V. Klochkov, E. V. Morozov, T. M. Salikhov, T. R. Safin, K. R. Safiullin, M. S. Tagirov and O. B. Shabanova // *Low Temp. Phys.* - 2015. - V. 41. - P. 39. (ISSN 1063-777X).
- Alakshin, E.M. Comments on the cross-relaxation effect between adsorbed ³He and PrF₃ nanoparticles / E.M.Alakshin, R.R.Gazizulin, A.M.Gazizulina, A.V.Klochkov, S.B.Orlinskii, A.A.Rodionov, T.R.Safin, K.R.Safiullin, M.S.Tagirov, and M.Yu.Zakharov // *Low Temp. Phys.* - 2015. - V. 41. - P. 47 (ISSN 1063-777X).
- Alakshin, E.M. Proton NMR of water colloidal solutions of nanosized crystalline LaF₃ and LaF₃:Gd³⁺ particles / E. M. Alakshin, B. I. Gizatullin, M. Yu. Zakharov, A. V. Klochkov, T. M. Salikhov, V. D. Skirda and M. S. Tagirov // *Low Temp. Phys.* - 2015. - V. 41. - P. 67. (ISSN 1063-777X).
- Klochkov, A.V. Magnetic resonance of ³He nuclei in porous media / A.V. Klochkov and M.S. Tagirov // *Low Temp. Phys.* - 2015. - V. 41. -P. 50. (ISSN 1063-777X).
- Zhikharev, V.A. Current problems in magnetic resonance and its applications: Anatole Abragam, Evgenii Zavoiskii, Kazan / V.A. Zhikharev and M.S. Tagirov // *Low Temp. Phys.* - 2015. - V.41. -P.1. (ISSN 1063-777X).
- Filippov A. Self-diffusion and interactions in mixtures of imidazolium bis(nandelato)borate ionic liquids with polyethylene glycol: ¹H NMR study / A. Filippov, N. Azancheev, M. Taher, F.U. Shah, P. Rabet, S. Glavatskih, O.N. Antzutkin // *Magnetic Resonance in Chemistry.* - 2015. (ISSN: 07491581).
- Gizatullin B. Study of the Distribution of Organic Molecules in the Porous Space of Vycor Glasses / B. Gizatullin, G. Pimenov // *Applied Magnetic Resonance.* - 2015. - V.46. - P.141–151. (ISSN: 09379347).
- Filippov, A.V. ³¹P NMR studies of Phospholipids / A.V. Filippov, A.M. Khakimov, B.V. Munavirov // *Annual Reports on NMR Spectroscopy.* - 2015. - V.85. (ISSN: 00664103).
- Savinkov, A.V. Crystal field simulation and NMR study of ¹⁹F in a EuF₃ Van Vleck paramagnet / A.V. Savinkov, A.V. Dooglav, B.Z. Malkin, M.S. Tagirov, S.L. Korableva // *Low Temperature Physics.* - 2015. - V.41. - P.75–80. (ISSN: 1063777X).
- Fatkullin N. Proton spin dynamics in polymer melts: new perspectives for experimental investigations of polymer dynamics / N. Fatkullin, S. Stapf, M. Hofmann, R. Meier, E.A. Rössler // *Journal of Non-Crystalline Solids.* - 2015. - V.407. - P. 309–317. (ISSN: 00223093).
- Fathia M. Dynamics of PPI Dendrimers: A Study by Dielectric and ²H NMR Spectroscopy, and by Field-Cycling ¹H NMR Relaxometry / M. Fathia, M. Hofmann, B. Poetzschner, N. Fatkullin, E. Roessler // *Macromolecules.* - 2015. (ISSN: 00249297).

ПАРТНЕРЫ

В России:

«Международный томографический центр», Новосибирск
 Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
 Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
 Московский государственный университет, Москва
 Институт биоорганической химии им. ак. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Москва
 Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону
 Казанский государственный медицинский университет, Казань
 Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань
 Казанский институт биохимии и биофизики КазНЦ РАН, Казань

В мире:

РИКЕН, Вако, Япония
 Институт генетики, молекулярной и клеточной биологии, Страсбург, Франция
 Медицинский центр университета Фрайбурга, Германия
 Мэрилендский университет, США
 Университет г. Чикаго, США
 Университет им. Юстуса Либига, г. Гиссен, Германия
 Университет Антверпена, г. Антверпен, Бельгия

КОМПЛЕКТАЦИЯ ОБОРУДОВАНИЯ



ЯМР спектрометр Bruker Avance II 500 МГц

ВВО – 5 мм двухканальный широкополосный датчик прямого наблюдения для растворов
ВВИ – 5 мм двухканальный инверсный датчик для растворов
ТХИ – 5 мм трехканальный инверсный датчик для растворов
4 мм датчик CP/MAS двойного резонанса

Двухканальные датчики позволяют проводить эксперименты с облучением образца на частоте резонанса протонов и на частотах в диапазоне ^{109}Ag – ^{31}P для ВВО и ^{97}Mo – ^{31}P для ВВИ, что подходит для большинства измерений в области органической химии.

Трёхканальные датчики позволяют вести измерения на ядрах ^1H , ^{13}C , ^{15}N (ТХИ) и ^1H , ^{31}P , X (ТВИ) и предназначены в первую очередь для биохимических исследований.

CP/MAS – проведение твердотельных экспериментов с порошковыми образцами (^1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{27}Al и др.); диаметр ротора 4 мм.

HR-MAS – для измерений вязких жидкостей, гелей и т.п. сред; рабочие каналы – ^1H и ^{13}C ; ротор 4 мм.

DUL (^1H , ^{13}C) для измерений при температурах от -180 до $+180^\circ\text{C}$.



ЯМР спектрометр Bruker Avance III 700 МГц

QCI – 5 мм четырехканальный криодатчик для растворов
ТХИ – 5 мм трехканальный инверсный датчик для растворов
4 мм датчик CP/MAS двойного резонанса

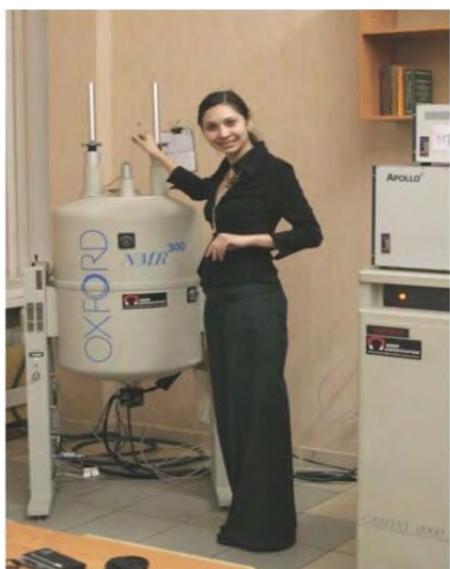
Регистрация спектров ЯМР на ядрах ^1H (700,13 МГц), ^{13}C , ^{31}P , ^{15}N , а также ^{19}F и ^2H . Проведение исследований в области биохимии и/или с образцами малой концентрации (датчик QCI). ^1H , ^{13}C , ^{31}P (датчик ТХИ). Ротор 1,9 мм (датчик CP/MAS).



ЯМР спектрометр Bruker Avance III 400 МГц с широким горлом

Спектрометр предназначен для проведения структурных и динамических исследований в наномасштабах в твердом теле, включая как неорганические, так и органические материалы, а также для исследования жидкофазных систем. Спектрометр позволяет регистрировать спектры ЯМР ядер большого числа элементов периодической таблицы Менделеева в большом диапазоне температур. Имеется возможность, применяя технику MAS, получать спектры ЯМР высокого разрешения в твердом теле. Возможности прибора в исследованиях самодиффузии на данный момент не имеют аналогов среди коммерческих приборов. Функция магнитно-резонансной томографии делает прибор незаменимым в решении задач материаловедения, исследования систем доставки лекарственных средств, а также в изучении организмов мелких животных *in vivo*.

Датчик широких линий с расширенным температурным диапазоном: широкополосные спектры разнообразных твердых тел. Твердотельный датчик CP/MAS: спектры разнообразных твердых тел на ядрах от ^{15}N до ^{31}P с развязкой от протонов, а также на ^1H и ^{19}F . Диффузионный датчик: коэффициенты самодиффузии молекул и ионов в многокомпонентных жидкостях, в гетерогенных средах, в биологических объектах. Томографический датчик: магнито-резонансные томограммы объектов с размерами до 30 мм в диаметре, контрастированные по спиновой плотности (ρ), по временам релаксации (T_1 и T_2), а также по коэффициентам самодиффузии (D).



Спектрометр-диффузомер "ГРАД М"

Спектрометр ЯМР высокого разрешения "Gemini 2000" (300 МГц) с приставкой импульсного градиента магнитного поля и управляющей консолью «Apollo» фирмы «Тесмаг», применяется для определения структуры соединений, качественного и количественного анализа состава сложных молекулярных систем в жидкой фазе, регистрации трансляционных смещений молекул в сложных молекулярных системах.

По коэффициентам самодиффузии, их спектрам и специфическим зависимостям от параметров эксперимента может быть получена информация:

- размер (молекулярная масса) молекул и макромолекул;
- распределение по молекулярным массам;
- параметры структурообразования в многокомпонентных смесях (например, нефти);
- кинетические характеристики процессов агрегации и гелеобразования с определением доли золь-фракции;
- характерные размеры макромолекулярных сеток;
- молекулярные механизмы свертывания крови;
- проницаемость клеток эритроцитов крови;
- проницаемость синтетических и биологических мембран;
- фазовое состояние молекулярных систем, включая липидные мембраны;
- геометрические хар-ки пористых сред и их проницаемость;
- состояние и локализация флюида в пористой среде;
- характеристики обменных процессов (спиновый, протонный, молекулярный и др. обмены);
- среднее время жизни надмолекулярных образований.



ЯМР релаксометр Bruker Minispec

Измеряются времена спин-решеточной и спин-спиновой релаксации с использованием штатных методик. Возможно составление собственной последовательности радиочастотных импульсов.

Исследование состояния жидких систем, включая нефтяные и жировые эмульсии, водные растворы. Используется при разработке новых парамагнитных контрастных агентов для магнитно-резонансной томографии.

Рабочая частота 20 МГц. Пределы допускаемой погрешности измерения времени релаксации для воды - 0.2 мс для T1 и 0.1 мс для T2; додекана - 12 мс для T1 и 2 мс для T2. Используется для измерения концентрации парамагнитных частиц (ионов металлов и их соединений) в растворах.



ЭПР спектрометр Bruker Elexsys 680

Многоцелевой спектрометр ЭПР/ДЭЯР W и X –диапазонов (9.4 и 9.6 ГГц), с возможностью работы в стационарном и импульсном режимах в диапазонах температур T = 6-293K. Позволяет проводить эксперименты по двойному электрон-ядерному (ДЭЯР) и двойному электрон-электронному (ДЭЭР, PELDOR) резонансам, эксперименты по фотоиндуцированному ЭПР в магнитных полях от 0 до 6 Т.



ЭПР спектрометр Bruker ESP 300

Многоцелевой спектрометр ЭПР/ДЭЯР X-диапазона (9.4-10 ГГц), T = 4-1000 K. Высокочувствительный резонатор (Q=6000) позволяет на высоком уровне проводить исследования с помощью спиновых меток и ловушек в химических и биологических системах.

ЭПР- центр КФТИ КазНЦ РАН



НАШ АДРЕС

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского Казанского научного центра Российской академии наук

Россия, 420029, Казань
ул. Сибирский тракт 10/7

phys-tech@kfti.knc.ru

www.kfti.knc.ru

КОНТАКТНЫЕ ДАННЫЕ КЛЮЧЕВЫХ СОТРУДНИКОВ



Академик
Кев Минуллинович Салихов
Научный руководитель КФТИ

salikhov@kfti.knc.ru
тел. (843) 231-91-06



Д.ф.-м.н.
**Виолета Константиновна
Воронкова**
Рук. лаборатории
спиновой физики и спиновой химии

vio@kfti.knc.ru
тел. (843) 231-90-86



Д.ф.-м.н., проф.
Валерий Федорович Тарасов
Рук. лаборатории
радиоспектроскопии диэлектриков

tarasov@kfti.knc.ru
тел. (843) 231-91-22



Д.ф.-м.н.
Гильман Султанович Шакуров
С.н.с. лаборатории
радиоспектроскопии диэлектриков

shakurov@kfti.knc.ru



Д.ф.-м.н., проф.
Игорь Васильевич Овчинников
Рук. лаборатории молекулярной
радиоспектроскопии

igovchinnikov@gmail.com
тел. (843)292-73-70



Д.ф.-м.н.
Владимир Юрьевич Петухов
Рук. лаборатории радиационной
химии и радиобиологии

petukhov@kfti.knc.ru
тел. (843)231-91-01



К.ф.-м.н.
Руслан Булатович Зарипов
 С.н.с. лаборатории спиновой физики и спиновой химии

zaripov.ruslan@gmail.com



К.ф.-м.н.
Андрей Анатольевич Суханов
 С.н.с. лаборатории спиновой физики и спиновой химии

ansukhanov@mail.ru



К.ф.-м.н.
Людмила Вячеславовна Мингалиева
 Н.с. лаборатории спиновой физики и спиновой химии

Ljudmila.vjacheslavovna@gmail.com



К.ф.-м.н.
Иван Владимирович Яцык
 Н.с. лаборатории спиновой физики и спиновой химии

i.yatzyk@gmail.com



К.ф.-м.н.
Михаил Леонидович Фалин
 С.н.с. лаборатории радиоспектроскопии диэлектриков

falin@kfti.knc.ru



К.ф.-м.н.
Владислав Альбертович Латышев
 С.н.с. лаборатории радиоспектроскопии диэлектриков

vlad@kfti.knc.ru



Марнсур Миннурович Ахметов
 М.н.с. лаборатории радиационной химии и радиобиологии

Mansuk86@mail.ru



К.ф.-м.н.
Ильшат Имаметдинович Фазлижанов
 С.н.с. лаборатории радиоспектроскопии диэлектриков

Ilshat2004@yandex.ru



К.ф.-м.н.
Андрей Борисович Конов
 Н.с. лаборатории спиновой физики и спиновой химии

Andrey654@yandex.ru



К.ф.-м.н.
Михаил Юрьевич Волков
 Н.с. лаборатории спиновой физики и спиновой химии

mihael-volkov@rambler.ru



К.ф.-м.н.
Айдар Азагович Валидов
 С.н.с. лаборатории физики перспективных материалов

validov@kfti.knc.ru



К.ф.-м.н.
Евгения Леонидовна Вавилова
 С.н.с. лаборатории физики перспективных материалов

Jenia.vavilova@gmail.com

ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

- Исследование систем, перспективных для квантовых компьютеров, спинтроники, оптоэлектроники и молекулярного магнетизма.
- Исследования фотоиндуцированных молекулярных процессов.
- Исследование внутримолекулярных и межмолекулярных обменных взаимодействий в многоядерных кластерах, супрамолекулярных архитектурах и низкоразмерных системах.
- Широкополосная ЭПР спектроскопия кристаллов, допированных переходными ионами и редкоземельными ионами.
- Исследование зарядового состояния ионов хрома в кристаллах синтетического форстерита, солегированного хромом и литием.
- Исследования (ЭПР, ДЭЯР, ОДМР) электронно-ядерных взаимодействий примесных редкоземельных ионов с ионами-лигандами ближайшего окружения в диэлектрических кристаллах со структурами перовскита и эльпасолита.
- Исследования магнитоупругих свойств кластеров примесных d-ионов с трехкратно вырожденными основными состояниями в кристаллах флюоритов.
- Исследование жидкокристаллических координационных соединений со спин-переменными свойствами.
- Исследования вопросов сверхпроводимости, магнетизма и фазовых переходов в сильно коррелированных электронных системах.
- Исследование интенсивности формирования оксида азота в тканях животных при внешнем воздействии на сердечно-сосудистую и нервную системы.

МЕТОДЫ И ОБОРУДОВАНИЕ

Импульсный ЭПР спектрометр с фурье-преобразованием: ELEXSYS E580 фирмы Брукер



Современный стационарный/импульсный спектрометр ЭПР X/Q частотных диапазонов (9.4/34ГГц)
Опции ELDOR
Температурный диапазон от 3.7 до 300 К
Максимальное магнитное поле 1.7 Тл.
Возможности импульсного фотовозбуждения Nd:YAG лазером с $\lambda = 266, 355, 532$ и 1064 нм и регистрация фотоиндуцированных состояний;
(Отв. Р.Б. Зарипов, к.ф.-м.н)

Импульсный ЭПР спектрометр с фурье-преобразованием ELEXSYS E680



Современный стационарный/импульсный спектрометр ЭПР X/W частотных диапазонов (9.4/94ГГц)
Опции ENDOR/ELDOR
Максимальное магнитное поле 6 Тл
Температурный диапазон от 3.7 до 300К
Возможности импульсного фотовозбуждения Nd:YAG лазером с $\lambda = 355, 532$ и 1064 нм и регистрация фотоиндуцированных состояний
(Отв. А.А. Суханов, к.ф.-м.н.)

Спектрометр EMXplus



Для исследования в стационарном режиме стабильных парамагнитных центров в X-диапазоне (9.4ГГц).
Максимальное магнитное поле 1.4 Тл
Максимальное число точек на координатной оси магнитного поля 256000.
Абсолютная точность магнитного поля ~ 100 нТл.
Чувствительность: $2 \cdot 10^{10}$ спин/мТл
Температурная область- от 4.2 до 300К. (Отв. Л.В. Мингалиева, к.ф.-м.н)

Субмиллиметровый спектрометр



Высокочастотный спектрометр, рабочая частота которого может плавно перестраиваться в диапазоне 65 – 1250 ГГц. В качестве генераторов микроволнового излучения в этом спектрометре используются лампы обратной волны производства НПО "Исток", г. Фрязино.
(Отв. В.Ф. Тарасов, д.ф.-м.н., Г.С. Шакуров, д.ф.-м.н.)

ЭПР-спектрометр фирмы Брукер Eleksys 540



Спектрометр ELEXSYS E540, работающий в L-диапазоне на частоте 1 ГГц, снабженный устройством для ЭПР-томографии и оптимизированный для исследования биологических объектов.
(Отв. М.М. Ахметов)

Спектрометр ЭПР BER 418 S производства фирмы "Bruker", Германия



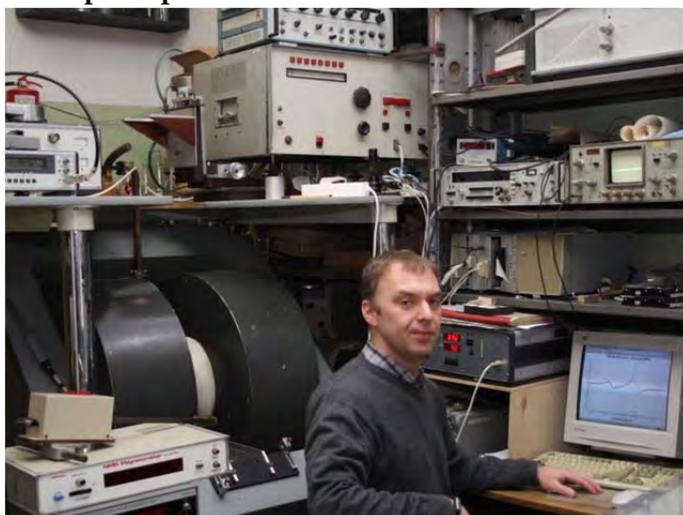
Спектрометр ЭПР BER 418 S производства фирмы "Bruker", Германия, в 2008 г. оснащен специализированным криостатом производства РНЦ "Курчатовский институт", позволяющим проводить измерения при сверхнизких температурах до 0.4 К.
(Отв. Валидов А.А., к.ф.м.н.)

Спектрометр оптико-магнитного резонанса с возможностью оптического детектирования ЭПР



Спектрометр оптико-магнитного резонанса с возможностью оптического детектирования ЭПР. Спектрометр позволяет в температурном диапазоне 2 - 300 К измерять оптические спектры поглощения, люминесценции, возбуждения люминесценции, исследовать ап-конверсионные процессы, осуществлять оптическое детектирование ЭПР (ОДЭПР) и двойного электронно-ядерного резонанса (ОДДЭЯР). Диапазон длин волн оптического излучения: 200 - 2000 нм., частота микроволнового излучения 9.0-37.0 ГГц, частота накачки ядерных спинов 1 - 1000 МГц.
(Отв. Фалин М.Л., к.ф.-м.н.)

Спектрометр ЭПР ERS-231



Чувствительность: $3 \cdot 10^{10}$ спин/ 10^{-4} Т;
Диапазон постоянного магнитного поля: 0.01-1.35 Т;
Частота СВЧ-накачки: 9.3-9.7 ГГц;
Диапазон частот радио-накачки для ДЭЯР: 0.1-100 МГц;
Максимальная мощность радио-накачки на 50-омной согласованной нагрузке: 100 Вт;
Времяразрешенный ЭПР:
диапазон времени сканирования: 1 мс - 10 с;
Оптическая подсветка образцов в резонаторе:
Частота: 20 мс - 10 с, Модуляция: 30 - 3000 Гц
Мощность кварцевой лампы: 200 Вт
Температурный диапазон: 2 - 550К. Отв. Латыпов В.А., к.ф.-м.н.

Спектрометр ЭПР E-12 (Varian)



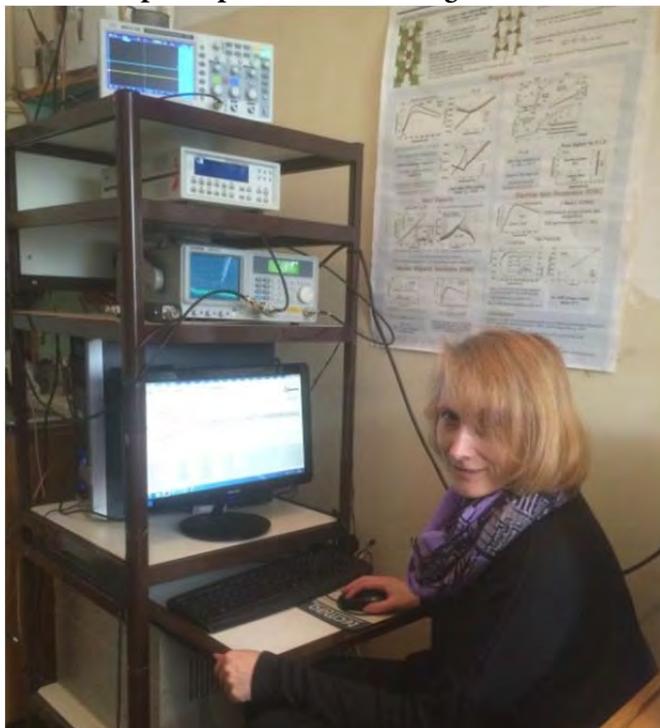
Для исследования в стационарном режиме в X (9,3 ГГц) и Q (37 ГГц) диапазонах и при температурах 4,2, 77 К и 300 - 500 К. Имеется приставка ДЭЯР. Максимальное магнитное поле в X-диапазоне 1.6 Тл, в Q- диапазоне 2.2Тл
Спектрометр снабжен гониометрическими устройствами, позволяющими с высокой точностью ориентировать исследуемый кристалл относительно направления внешнего магнитного поля.
(Отв. Фазлижанов И.И., к.ф.-м.н.)

ЯМР-спектрометр AVANCE 400



Многоядерный Фурье-спектрометр с частотой для ядер водорода 400 МГц. Позволяет получать одномерные и двумерные спектры ЯМР высокого разрешения для веществ в твёрдом и жидком состояниях. Возможно снятие спектров с динамической развязкой, измерение коэффициента диффузии с использованием встроенного градиента магнитного поля, а также времён магнитной релаксации.
(Отв. Конов А.Б., к.ф.-м.н., Волков М.Ю., к.ф.-м.н.)

ЯКР спектрометр Redstone Тесмаг



ЯКР спектрометр Redstone Тесмаг, рабочая частота 0.2-120МГц, широкополосный выходной тракт, возможность двухчастотных экспериментов. Имеются приставки для экспериментов в температурном диапазоне 3 - 350К.
(Отв. Вавилова Е.Л., к.ф.-м.н.)

2014

1. Altshuler, T. S. Hidden antiferromagnetic order in EuB6 revealed by X-band ESR [Text] / T. S. Altshuler, Yu. V. Goryunov, N. Yu. Shitsevalova [et al.] // Appl. Magn. Reson. – 2014. - DOI 10.1007/s00723-014-0598-3.
2. Eremina, R. M. Anisotropic exchange and effective crystal field parameters for low dimensional systems, EPR data [Text] / R. M. Eremina // Magn. Reson. in Solids. - Vol. 16. - No. 1. – 2014. – P. 14102(1) – 14102(8).
3. Falin, M. L. Determination of the position of the impurity Yb³⁺-ion in the CsCaF₃ crystals [Text] / M. L. Falin, K. I. Gerasimov, V. A. Latypov // Appl. Magn. Reson. - Vol. 45. - No. 7. - 2014. – P. 707-714.
4. Garifullin, I. A. The peculiarities of the operation of the superconducting spin valve [Text] / I. A. Garifullin, N. N. Garifyanov, P. V. Leksin [et al.] // Magn. Reson. Solids. - Vol. 16. - Iss. 2. - 2014. – P. 14208(1) – 14208(12).
5. Gerasimov, K. I. Room-temperature storage of electromagnetic pulses on a high-finesse natural spin-frequency comb [Text] / K. I. Gerasimov, S. A. Moiseev, V. I. Morosov [et al.] // Phys. Rev. A. - Vol. 90. – 2014. – P. 042306(1) – 042306(6).
6. Kandrashkin, Yu. E. Orientation information from the dipolar interaction between a complex in the excited quartet state and a doublet spin label [Text] / Yu. E. Kandrashkin, A. van der Est // Appl. Magn. Reson. - Vol. 45. - No. 3. – 2014. – P. 217-237.
7. Konov, K. B. Low-temperature molecular motions in lipid bilayers in presence of sugars: insights into cryoprotective mechanisms [Text] / K. B. Konov, N. P. Isaev, S. A. Dzuba // J. Phys. Chem. B. – Vol. 118. - No. 43. – 2014. – P. 12478–12485.
8. Konov, K. B. Low-temperature molecular motions in phospholipid bilayers in presence of glycerol as studied by spin-echo EPR of spin labels [Text] / K. B. Konov, N. P. Isaev, S. A. Dzuba // Appl. Magn. Reson. – Vol. 45. – 2014. – P. 1117–1126.
9. Konovalov, A. A. High-frequency EPR spectroscopy of Tb³⁺ ions in synthetic forsterite [Text] / A. A. Konovalov, D. A. Lis, K. A. Subbotin [et al.] // Appl. Magn. Reson. – Vol. 45. - No. 2. – 2014. – P. 193-206.
10. Salikhov, K. M. Four-pulse ELDOR theory of the spin ½ label pairs extended to overlapping EPR spectra and to overlapping pump and observer excitation bands [Text] / K. M. Salikhov, I. T. Khairuzhdinov // Appl. Magn. Reson. – Vol. 45. – 2014. - DOI: 10.1007/s00723-014-0609-4.
11. Salikhov, K. M. PELDOR theory revisited [Text] / K. M. Salikhov, I. T. Khairuzhdinov, R. B. Zaripov // Appl. Magn. Reson. – Vol. 45. – 2014. – P. 573-619.
12. Salikhov, K. M. Spin exchange between charged paramagnetic particles in dilute solutions [Text] / K. M. Salikhov, A. E. Mambetov, M. M. Bakirov [et al.] // Appl. Magn. Reson. – Vol. 45. – 2014. – P. 911-940.
13. Shakurov, G. S. Random strain effects in optical and EPR spectra of electron-nuclear excitations in CaWO₄:Ho³⁺ single crystals [Text] / G. S. Shakurov, E. P. Chukalina, M. N. Popova [et al.] // Phys. Chem. Chem. Phys. – Vol. 16. – 2014. – P. 24727-24738.
14. Talanov, Yu. EPR study of the local magnetic field distribution over the Bi₂Sr₂Ca_{1-x}Y_xCu₂O_{8+y} crystal surface above the superconducting transition temperature [Text] / Yu. Talanov, L. Salakhutdinov, T. Adachi [et al.] // Appl. Magn. Reson. – 2014. - In press.
15. Tarasov, V. F. Combined magneto-electric spin resonance of impurity Ho ions in synthetic forsterite [Text] / V. F. Tarasov, R. B. Zaripov, N. K. Solovarov [et al.] // Appl. Magn. Reson. – Vol. 45. - No. 3. – 2014. – P. 239-253.
16. Turanov, A. Proton NMR characterization of gasoline–ethanol blends [Text] / A. Turanov, A. K. Khitrin // Fuel. - Vol. 137. – 2014. – P. 335–338.
17. Turanova, O.A. Role of aromatic hydrocarbons in sediment formation in transformer oil [Text] / O. A. Turanova, Yu. K. Bikkinyaeva, L. G. Gafiyatullin [et al.] // Chemistry and Technology of Fuels and Oil. - Vol. 9. - No. 6. – 2014. – P. 517-521.
18. Validov, A. A. ESR of coupled spin-1/2 chains in copper pyrazine dinitrate: unveiling geometrical frustration [Text] / A. A. Validov, M. Ozerov, J. Wosnitza [et al.] // J. Phys.: Condens. Matter. - Vol. 26. - No. 2. – 2014. – P. 026003(1) – 026003(5).
19. Vorobeva, V. E. Optical properties and photoinduced superparamagnetism of γ-Fe₂O₃ nanoparticles formed in dendrimer [Text] / V. E. Vorobeva, N. E. Domracheva, M. S. Gruzdev [et al.] // Mater. Sci. Semicond. Process. – 2014. - doi: 10.1016/j.mssp.2014.09.045.
20. Vorobeva, V. E. Coexistence of spin crossover and magnetic ordering in the dendrimeric iron(III) complex [Текст] / V. E. Vorobeva, N. E. Domracheva, A. V. Pyataev // Proc. of the XVII Int. Youth Sci. School «Actual Problems of Magnetic Resonance and Its Application» / Eds. M. S. Tagirov, V. A. Zhikharev. - Kazan: Kazan University, 2014. - P. 102-105.
21. Zhukova, E. S. Quantum behavior of water molecule in gemstone: terahertz fingerprint [Text] / E. S. Zhukova, B. P. Gorshunov, V. I. Torgashev [et al.] // J. Phys.: Conf. Ser. – Vol. 486. – 2014. - 012019(1) – 012019(2).
22. Zhukova, E. S. Vibrational states of water molecule in a nanocavity of beryl crystal lattice [Text] / E. S. Zhukova, B. P. Gorshunov, V. I. Torgashev [et al.] // J. Chem. Phys. – Vol. 140. – 2014. – P. 224317(1) – 224317(11).
23. Гафиятуллин, Л. Г. Факторы, влияющие на фотоизомеризацию 4-стирилпиридина [Текст] / Л. Г. Гафиятуллин, Л. И. Савостина, О. И. Гнездилов [и др.] // Журн. общей химии. - Т. 84. - № 6. – 2014. – С. 966 – 972.

24. Зарипова, Р. И. Влияние гипокинезии различной длительности на динамику продукции оксида азота в сердце, спинном мозге и печени крыс [Текст] / Р. И. Зарипова, В. В. Андрианов, Г. Г. Яфарова [и др.] // Рос. физиологический журн. - № 8. - 2014. - С. 926-935.
25. Зарипова, Р. И. Влияние блокады NO-синтаз на продукцию NO в сердце крыс при гипокинезии [Текст] / Р. И. Зарипова, Х. Л. Гайнутдинов, Т. Л. Зефилов // Бюл. эксперим. медицины и биологии. - Т. 157. - № 5. - 2014. - С. 554-556.
26. Ибрагимова, М. И. Исследование методами ЭПР-спектроскопии и биохимического анализа особенностей обмена железа у профессиональных спортсменов [Текст] / М. И. Ибрагимова, А. И. Чушников, Г. В. Черепнёв [и др.] // Сб. тез. VI Троицкой конф. «Медицинская физика и инновации в медицине». Троицк, 2 – 6 июня 2014. - М.: Изд-во «Тровант», 2014. - С. 557-559.
27. Ибрагимова, М. И. Исследование методом ЭПР статуса железа в организме при интенсивных физических нагрузках [Текст] / М. И. Ибрагимова, А. И. Чушников, Г. В. Черепнёв [и др.] // Биофизика. - Т. 59. - № 3. - 2014. - С. 520-526.
28. Карпичёв, Е. А. Самоорганизация симметричных и диссимметричных дикаатионных ПАВ в твёрдой фазе и в растворе [Текст] / Е. А. Карпичёв, Л. Я. Захарова, Н. К. Гайсин [и др.] // Изв. РАН. Сер. хим. - № 1. - 2014. - С. 68-75.
29. Осокин, Д. Я. Оптимальная фильтрация в многоимпульсных последовательностях при ЯКР-детектировании [Текст] / Д. Я. Осокин, Р. Р. Хуснутдинов, Г. В. Возжухин [и др.] // Журн. техн. физики – Т. 84. - Вып. 5. - 2014. - С. 122-126.
30. Туранова, О. А. Синтез и жидкокристаллические свойства моно - и биядерных комплексов Fe(III) с пентадентатным основанием Шиффа» [Текст] / О. А. Туранова, Г. И. Иванова, Л. Г. Гафиятуллин [и др.] // Журн. общей химии. - Т. 84. - № 11 - 2014. - С. 1878 – 1883.
31. Хабибрахманов, И. И. Влияние острой ваготомии на содержание оксида азота в сердце крыс [Текст] / И. И. Хабибрахманов, В. В. Андрианов, Х. Л. Гайнутдинов [и др.] // Фундаментальные исслед. - № 11. - 2014. - С. 1086-1089.

2015

1. Abdulmalic Mohammad A., Azar Aliabadi, Andreas Petr, Yulia Krupskaya, Vladislav Kataev, Bernd Buchner, Ruslan Zaripov, Evgeniya Vavilova, Violeta Voronkova, Kev Salikhov, Torsten Hahn, Jens Kortus, Francois Eya'ane Meva, Dieter Schaarschmidt and Tobias Ruffer. Magnetic superexchange interactions: trinuclear bis(oxamidato) versus bis(oxamato) type complexes. Dalton Trans., **44**, 8062-8079 (2015)
2. Aliabadi, R. Zaripov, K. Salikhov, V. Voronkova, E.Vavilova, M. A. Abdulmalic, T. Ruffer, B.Buchner, and V. Kataev, Electron Spin Density on the N-Donor Atoms of Cu(II)–(Bis)oxamidato Complexes As Probed by a Pulse ELDOR Detected by NMR/A. J.Phys.Chem.B 2015. Том: 119 Выпуск: 43 Стр.: 13762-13770
3. Altshuler, T. S.; Goryunov, Yu V.; Shitsevalova, N. Yu; и др. Hidden Antiferromagnetic Order in EuB6 Revealed by X-Band ESR, Applied Magnetic Resonance, V. 46, Issue 1, pp 25-32 Andrianov V.V., Bogodvid T.Kh.,
4. Ay F., B. Aktaş, R.I. Khaibullin, V.I. Nuzhdin, B.Z. Rameev, Magnetic properties of Ni-implanted ITO thin films, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Vol. 375 (2015) pp. 129-135,
5. Domracheva N.E., Vorobeva V.E., Gruzdev M.S., Pyataev A.V. «Blue shift in optical absorption, magnetism and light-induced superparamagnetism in γ -Fe₂O₃ nanoparticles formed in dendrimer» // Journal of Nanoparticle Research. Vol. 17. Issue 2. 2015. p. 1-8
6. Falin M.L., K.I. Gerasimov, V.A. Latypov, A.M. Leushin, S. Schweizer, J.-M. Spaeth. EPR, ENDOR and optical spectroscopy of Yb³⁺ ion in KZnF₃ single crystals. Journal of Physics and Chemistry of Solids **77**, 157–163 (February 2015)
7. Falin M.L., M.M. Zaripov, V.A. Latypov. EPR of Nd³⁺ ions in the common position in a cubic single crystal KZnF₃. Applied Magnetic Resonance, 2015. Принята в печать. 10.1007/s00723-015-0749
8. Garifullin I. A. EPR Study of Superconductors. J Low Temp Phys **178**:243–271 (2015)
9. Gerasimov K. I., S. A. Moiseev, V. I. Morosov, and R. B. Zaripov. Spin frequency comb echo memory controlled by a pulsed-gradient of magnetic field. SPIE Vol. 9533, 953310 (1-8) (2015).
10. Gimazov I.I., Yu.I. Talanov. Electron Spin Resonance Study of the demagnetization fields of the ferromagnetic and paramagnetic films. "Magnetic Resonance in Solids", Volume 17, No 2. , Paper No. 15203 (5 pp.) (2015)
11. Ivanshin, V. A., Litvinova, T. O., Gimranova, K., Sukhanov, A. A., Jia, S., Bud'ko, S. L., & Canfield, P. C. (2015, March). Dual nature of 3d electrons in YbT₂Zn₂₀ (T= Co; Fe) evidenced by electron spin resonance. Journal of Physics: Conference Series (Vol. 592, No. 1, p. 012084). IOP Publishing.
12. Konov A.B., M.F. Sadykov, A. Tirkyja. Shape optimization of radiating and receiver coils for NMR / NQR detection of forbidden substances: numerical calculation and real experiment. Applied Magnetic Resonance. Принята в печать.
13. Konov K. B., D. V. Leonov, Nikolay P. Isaev, Kirill Yu. Fedotov, V. K. Voronkova, and Sergei A. Dzuba, Membrane–Sugar Interactions Probed by Pulsed Electron Paramagnetic Resonance of Spin Labels. J. Phys. Chem. B, 2015, Том: 119 Выпуск: 32 Стр.: 10261-10266 DOI: 10.1021/acs.jpccb.5b06864.

14. Salikhov K.M., I.T. Khairuzhdinov. Four-Pulse ELDOR Theory of the Spin Label Pairs, Extended to Overlapping EPR Spectra and to Overlapping Pump and Observer Excitation Bands. *Appl. Magn. Reson.* **46**, 67-83 (2015)
15. Selivanova N.M., A.B. Konov, K.A. Romanova, A.T. Gubaidullin, Yu.G. Galyametdinov. Lyotropic La-containing lamellar liquid crystals: phase behaviour, thermal and structural properties. *Soft Matter*, 2015. v. 11. pp. 7809-7816
16. Sukhanov A. A., K. B. Konov, K. M. Salikhov, V. K. Voronkova, E. A. Mikhailitsyna, V. S. Tyurin. Time-Resolved Continuous-Wave and Pulse EPR Investigation of Photoinduced States of Zinc Porphyrin Linked with an Ethylenediamine Copper Complex. *Appl. Magn. Reson.* ,46, 1190-1220(2015), DOI 10.1007/s00723-015-0705-0
17. Talanov Yu., L. Salakhutdinov, T. Adachi, T. Noji, Y. Koike.
EPR study of the local magnetic field distribution over the $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x\text{Cu}_2\text{O}_{8+y}$ crystal surface above the superconducting transition temperature
Appl. Magn. Resonance v.46, Issue 8, pp 897-907 (2015).
18. Vorobeva V.E., Domracheva N.E., Pyataev A.V., Gruzdev M.S., Chervonova U.V., “Coexistence of spin-crossover and magnetic ordering in the dendrimeric Fe(III) complex”, *Low Temperature Physics* 41 (2015), 1.4906311
19. Vorobeva V.E., N.E. Domracheva, M.S. Gruzdev, A.V. Pyataev, Optical properties and photoinduced superparamagnetism of $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ nanoparticles formed in dendrimer», *Materials Science in Semiconductor Processing*, 38 (2015), 336-341
20. Галеев Р. Проявление антипересечения уровней энергии в спектрах ЭПР спиновых кластеров, ФТТ. В печати
21. Еремина Р.М., Т.П. Гаврилова, И.И. Фазлижанов, И.В. Яцык, Д.В. Мамедов, А.А. Суханов, В.И. Чичков, Н.В. Андреев, Х.-А. Круг фон Нидда, А. Лойдл. Осцилляции в спектре ЭПР интерфейсов мультиферроик/ферроэлектрик $\text{GdMnO}_3/\text{SrTiO}_3$ и $\text{YbMnO}_3/\text{SrTiO}_3$. *Физика низких температур/Low Temperature Physics*, т.41, 57-61 (2015)
22. Иванова Т.А., И.В. Овчинников, И.Ф. Гильмутдинов, Л.В. Мингалиева, О.А. Туранова, Г.И. Иванова. «Особенности спин-переменных свойств $[\text{Fe}(\text{acen})\text{pic}_2]\text{VPh}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ » // *ФТТ*, 58, 2, 273-277 (2016)
23. Кутырева М. П., А. Р. Гатаулина, Г. А. Кутырев, Н. А. Улахович, А. В. Сурнова, С. В. Юртаева. «Сверхразветвленные полиэфирополи(3-диэтиламино)пропионаты и их металлокомплексы с ионами меди(II)» // *Известия Академии наук. Серия химическая* (2015) № 11 с. 2667-2677

Лаборатория структурной химии Института нефтехимии и катализа РАН

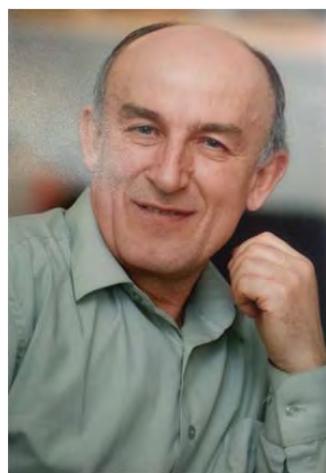
О ЛАБОРАТОРИИ И ИСТОРИИ ЯМР В УФЕ

В 1970 году из Института кинетики и горения СОАН СССР (г.Новосибирск) в Институт химии Башкирского филиала Академии наук директором Института член-корр. АН СССР **Рафиковым**



Сагит Рауфовичем был приглашен специалист по магнитному резонансу - **Заев Евгений Емельянович**, один из сотрудников исследовательской группы академика **Молина Юрия Николаевича**. Там он основал лабораторию спектральных методов, где первым прибором стал чешский спектрометр ЯМР BS-487 на ядрах протонов. Научные интересы Заева Е.Е. касались исследований методами ЯМР и ЭПР мицеллярных систем как моделей биологических мембран. В 1975 году он направил своего сотрудника Халилова Л.М. в Новосибирский Институт органической химии СОАН на трехмесячную стажировку в лабораторию **Коптюга Валентин Афанасьевича**, где наряду со спектральными методами, он познакомился с механизмами ионных реакций и идентификацией карбкатионов и карбанионов методами низкотемпературной

ЯМР ^{13}C спектроскопии, что оказалось весьма полезным впоследствии при изучении механизмов каталитических реакций. Через несколько лет по результатам изысканий в области d-pi - p-pi взаимодействий в алкенилсиланах и структуры алюминийорганических соединений методами ЯМР в 1981 году Халиловым Л.М. была защищена первая кандидатская диссертация в Уфе с использованием методов спектроскопии ЯМР ^{13}C , а в 1991 году - первая докторская по теме «**Диастереомерные эффекты в спектроскопии ЯМР ^{13}C полициклических и биологически активных соединений**». В это время также были защищены четыре кандидатские работы (Спирихин Л.В., Васильева Е.Д., Фатыхов А.А., Муслухов Р.Р.) с применением методов ЯМР для установления структуры органических и металлоорганических соединений.



В 1992 году в рамках создаваемой Академии наук Республики Башкортостан по инициативе директора-организатора член-корр. РАН **Джемилева Усеина Меметовича** был учрежден **Институт нефтехимии и катализа**, принятый в состав **Российской академии наук в 2004 г.**

В декабре 1992 года в качестве одного из подразделений Института была основана **Лаборатория структурной химии** с основной задачей - обеспечение проводимых научных исследований на мировом уровне.

Халилов Леонард Мухибович - заведующий лабораторией структурной химии ИНК РАН.

КАДРЫ ЛАБОРАТОРИИ

Со дня создания в лаборатории подготовлены и защитились два доктора химических наук (Р.А.Садыков, 2009, Л.В.Парфенова, 2012) и 10 кандидатов химических наук (Парфенова Л.В., Русаков С.В., Печаткина С.В., Вильданова Р.Ф., Самохина М.Г., Петров П.Н., Берестова Т.В., Панкратьев Е.Ю., Габдрахманов В.З., Ковязин П.В.). В настоящее время в лаборатории трудятся 12 сотрудников, в том числе 2 доктора и 4 кандидата наук. В лаборатории обучаются пять аспирантов, четыре магистранта и пять студентов.



Благодаря огромной поддержке Российской академии наук в лице его бывшего Президента академика **Осипова Юрия Сергеевича**, академика **Месяца Геннадия Андреевича**, а также организаторским усилиям директора Института нефтехимии и катализа РАН член-корр. РАН **Джемилева У.М.** в настоящее время Институт оснащен современным научным оборудованием.

ОСНОВНОЕ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЕ ОБОРУДОВАНИЕ

- Спектрометр ЯМР Bruker ASCEND-500 (500 МГц, с мультядерным ВВО Z-градиентным датчиком с низкотемпературной приставкой -160 до $+200$ С⁰, Германия, 2013 г.);
- Спектрометр ЯМР Bruker AVANCE-400 (400 МГц, с мультядерными ВВО и ВВИ инверсным датчиками с низкотемпературной приставкой, Германия, 2007 г., модернизация 2012);
- Монокристалльный рентгеновский диффрактометр XCalibur (Co, Agilent Technologies, Великобритания, 2012 г.)
- Масс-спектрометр MALDI-TOF/TOF Autoflex (250000 Dalton, Bruker, Германия, 2008 г.)
- Спектрометр инфракрасный ИК-Фурье Vertex-70V (вакуумный, PerkinElmer, США, 2009)
- Роботизированный хроматомасс-спектрометр Shimadzu GC/MS-2010 Ultra (Япония, 2010 г.)
- Полифункциональный дихрометр СКД 2МУФ (Институт спектроскопии РАН, Россия, 2010)
- Спектрофлуориметр FluoroLog-3 Horiba Jobin Yvon (модель FL-3-22, Япония-Франция, 2012).
- Суперкомпьютер SuperServer 8046B-TRLF (4 x Intel Xeon-7500-8-core, Intel, США, 2014).
- Лабораторный автоклав (0.1, 0.25, 1 л, MIDI-CLAVE, BUCHI, Швейцария, 2011).

ЦЕНТР КОЛЛЕКТИВНОГО ПОЛЬЗОВАНИЯ «АГИДЕЛЬ» ПРИ ИНСТИТУТЕ НЕФТЕХИМИИ И КАТАЛИЗА РАН

Лаборатория структурной химии является одной из базовых лабораторий ЦКП «Агидель» при ИНК РАН, оборудование которого находится в коллективном доступе: <http://ckp-rf.ru/ckp/3314/>.

Научная тематика лаборатории

Механизм циркониевого катализа в реакциях алюминийорганических соединений с олефинами, диенами и ацетиленами.

Основные направления исследований

- Экспериментальные и теоретические исследования механизмов реакций непредельных соединений с АОС, катализируемых комплексами Zr и Ti.
- Структурные исследования органических, элементо- и металлоорганических соединений и углеродных кластеров методами мультиядерной и двумерной ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии и рентгеновской дифрактометрии.
- Экспериментальное и теоретическое исследование влияния хиральных элементов на спектральные характеристики ЯМР и параметры кристаллов органических, металло- и элементоорганических соединений.

Избранные ссылки по разделу

1. E.E.Zaev, L.M.Khalilov, [Micellar and emulsion catalysis of water protons exchange in hydration shell of ion VO²⁺](#), Colloid Journal of the USSR, 36 (1), 147-148, 1974.
2. E.E.Zaev, L.M.Khalilov, [PMR investigation of the penetration of electrolytes into oxyethyl layers of micelles of nonionogenic surfactants](#). Colloid Journal of the USSR, 46 (3), 383-388, 1980.
3. Статья о Заеве Е.Е.: <http://sci-pub.info/ref/5116962/>.
4. Публикации Халилова Л.М.: https://www.researchgate.net/profile/Leonard_Khalilov2/publications.

КАК НАС НАЙТИ

г. Уфа, Проспект Октября, 141
Институт нефтехимии и катализа РАН, ком. 25
<http://ipc-ras.ru/>
Тел.: +79053594137
khalilovlm@gmail.com

КАРТА



ДИНАМИЧЕСКАЯ ЯМР-СПЕКТРОСКОПИЯ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ИССЛЕДОВАНИИ МЕХАНИЗМОВ КАТАЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ.



Парфенова Людмила Вячеславовна, д.х.н., доцент, старший научный сотрудник лаборатории структурной химии (2000-2015), зав. лабораторией органического синтеза (с 2015 г.), luda_parfenova@mail.ru.

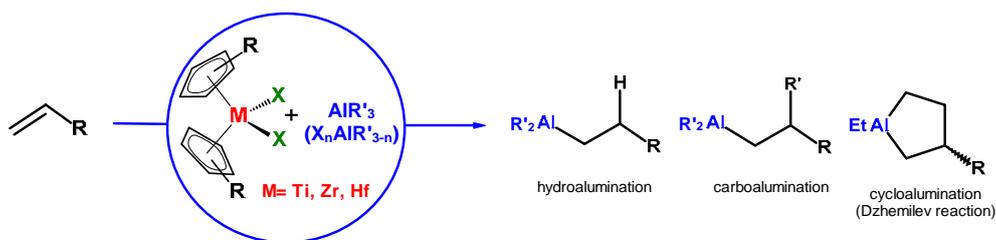


Тюмкина Татьяна Викторовна, к.х.н., доцент, старший научный сотрудник лаборатории структурной химии, ttvnmr@gmail.com.



Ковязин Павел Викторович, к.х.н., младший научный сотрудник лаборатории структурной химии, kp38@mail.ru.

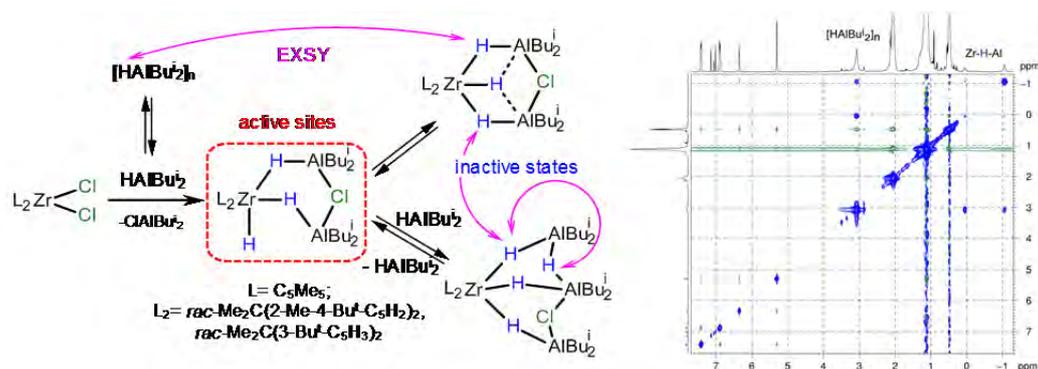
Механизмы реакций алюминийорганических соединений с олефинами и ацетиленами, катализируемых комплексами циркония



В обзоре впервые обобщены и систематизированы результаты исследований зарубежных и отечественных исследователей по изучению механизмов реакций гидро-, карбо- и циклоалюминирования олефинов и ацетиленов, катализируемых комплексами циркония. Приведены сведения о строении промежуточных комплексов, ответственных за образование целевых соединений, а также подробно рассмотрены имеющиеся данные о влиянии структуры алюминийорганических соединений (АОС), электронных и стерических факторов, определяющих каталитическую активность металлокомплексов в этих реакциях. Большое внимание уделено изучению влияния условий реакций на хемо-, регио- и стереоселективность взаимодействия непредельных соединений с АОС под действием Zr-содержащих комплексных катализаторов.

- Парфенова Л.В., Халилов Л.М., Джемилев У.М., *Успехи химии (Russ. Chem. Rev.)*, **2012**, 81, 524-548. DOI: 10.1070/RC2012v081n06ABEH004225.

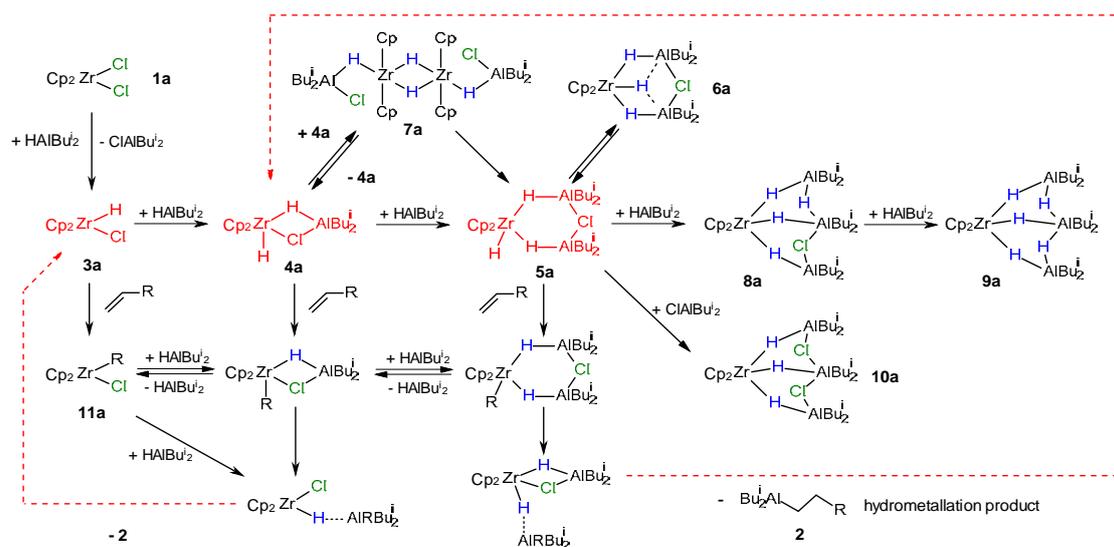
Role of Zr,Al-Hydride Intermediate Structure and Dynamics in Alkene Hydroalumination with $XAlBu_2$ ($X = H, Cl, Bu^i$), Catalyzed by Zr η^5 -Complexes



The zirconocene complexes L_2ZrCl_2 ($L = C_5H_5, C_5H_4Me, Ind, C_5Me_5$; $L_2 = rac\text{-}Me_2C(2\text{-}Me\text{-}4\text{-}Bu^i\text{-}C_5H_2)_2, meso\text{-}Me_2C(2\text{-}Me\text{-}4\text{-}Bu^i\text{-}C_5H_2)_2, rac\text{-}Me_2C(3\text{-}Bu^i\text{-}C_5H_3)_2, rac\text{-}Me_2C(Ind)_2, rac\text{-}Me_2Si(Ind)_2, and rac\text{-}C_2H_4(Ind)_2$) were tested as catalysts in the alkene hydroalumination by isobutylalanes $XAlBu_2$ ($X = H, Cl, Bu^i$). The low-temperature NMR spectroscopy study on the structure and dynamics of Zr,Al-intermediates formed in the L_2ZrCl_2 - $XAlBu_2$ systems showed that the intra- and intermolecular exchange in the bimetallic clusters, controlled by the steric factor of the η^5 -ligand and organoaluminum compound nature, determines the activity of the whole catalytic system.

- Parfenova L.V., Kovyazin P.V., Nifant'ev I.E., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. *Organometallics*, **2015**, 34 (14), 3559–3570. DOI: 10.1021/acs.organomet.5b003

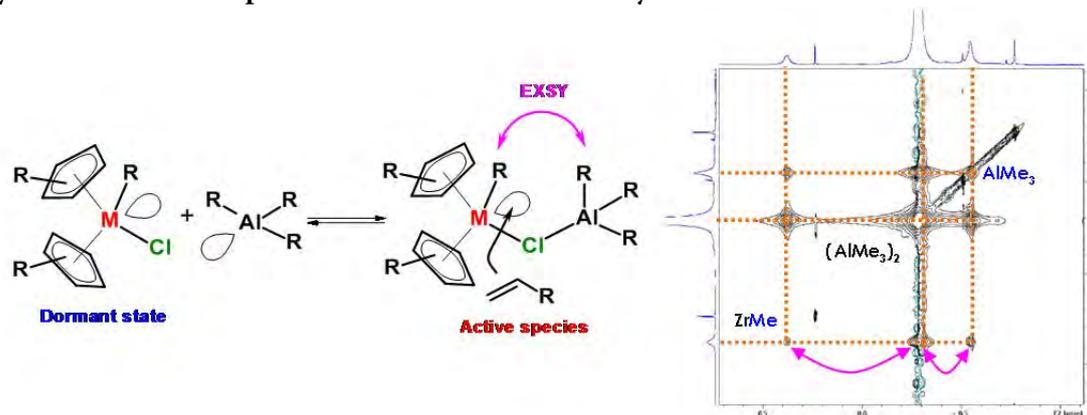
DFT and Ab Initio Study on Mechanism of Olefin Hydroalumination by $XAlBu_2$ in the Presence of Cp_2ZrCl_2 Catalyst



The mechanism of alkene hydroalumination by $HAlBu_2$ catalyzed with Cp_2ZrCl_2 has been studied computationally at DFT and MP2 levels of theory. The mechanism involves several catalytic cycles with the following stages: active centers formation, alkene hydrozirconation, transmetalation, and regeneration of key intermediates. Complexes Cp_2ZrHCl , $[Cp_2ZrH_2 \cdot ClAlBu_2]$, $[Cp_2ZrH_2 \cdot HAlBu_2 \cdot ClAlBu_2]$ and $[Cp_2ZrH_2 \cdot (HAlBu_2)_2]$ are considered as active species of the catalytic process. It has been shown that the hydrometallation ability of the complexes decreases in the series $Cp_2ZrHCl > [Cp_2ZrH_2 \cdot ClAlBu_2] > [Cp_2ZrH_2 \cdot HAlBu_2 \cdot ClAlBu_2] > [Cp_2ZrH_2 \cdot (HAlBu_2)_2]$; this is caused by an increase in the number of Zr-H-Al bridge bonds as a result of consecutive $HAlBu_2$ addition. For comparison, thermodynamic and activation parameters of a non-catalytic propene reaction with $HAlBu_2$ was calculated.

- Pankratyev E.Yu., Tyumkina T.V., Parfenova L.V., Khalilov L.M., Khursan S.L., Dzhemilev U.M. *Organometallics*, **2009**, 28, 968 – 977. DOI: 10.1021/om800393j.
- Pankratyev E.Yu., Tyumkina T.V., Parfenova L.V., Khalilov L.M., Khursan S.L., Dzhemilev U.M., *Organometallics*, **2011**, 30, 6078–6089. DOI: 10.1021/om200518h.

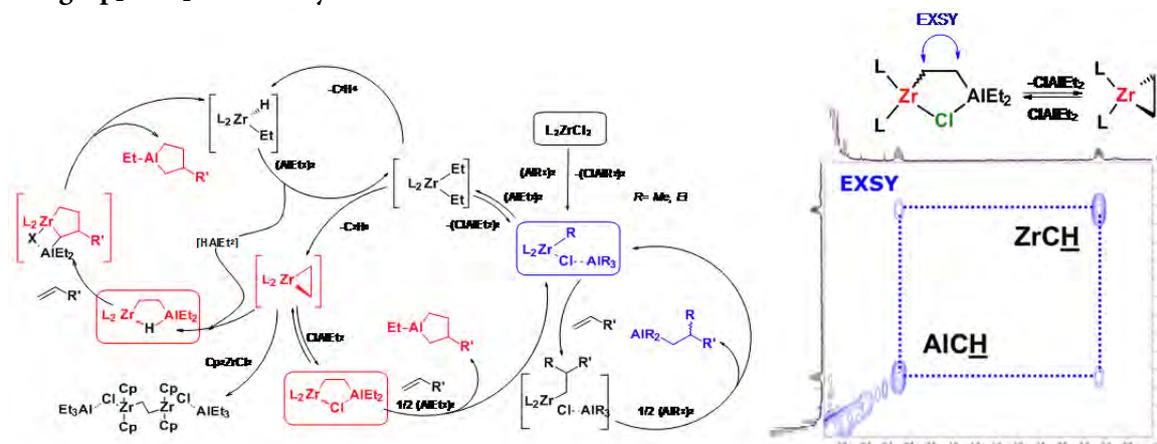
Alkyl Zirconocene Complexes as Intermediates in Catalytic Alkene Carboalumination



The effect of the organoaluminium compound nature, Zr π -ligand environment, solvent type and reagent ratio on the chemoselectivity of reactions of trialkylalanes (AlMe_3 , AlEt_3) with alkenes, catalyzed with L_2ZrCl_2 [$\text{L} = \text{Cp}$, Cp' ($\text{Cp}' = \eta^5\text{-C}_5\text{H}_4\text{CH}_3$), Cp^* ($\text{Cp}^* = \eta^5\text{-C}_5(\text{CH}_3)_5$), Ind (indenyl), Flu (fluorenyl)] has been studied. It is shown that in the case of AlMe_3 , the hydro- and carboalumination products, and alkene dimers are formed. The catalytic reaction of AlEt_3 with the olefins yields aluminacyclopentanes altogether with the hydro- and carboalumination products, and the dimers. A probable reaction mechanism has been proposed. The processes of Me-Cl exchange in the reaction of zirconocenes with AlMe_3 and structure of bimetallic intermediates have been studied by the means of NMR spectroscopy. The constants and activation parameters of exchange have been established from 2D EXSY experiments. The obtained results confirm the intermolecular character of the exchange. The constants and activation parameters were compared with the activity and chemoselectivity of the catalytic system.

- Parfenova L.V., Gabdrakhmanov V.Z., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M., *J. Organomet. Chem.*, **2009**, 694, 3725-3731. DOI:10.1016/j.jorganchem.2009.07.037

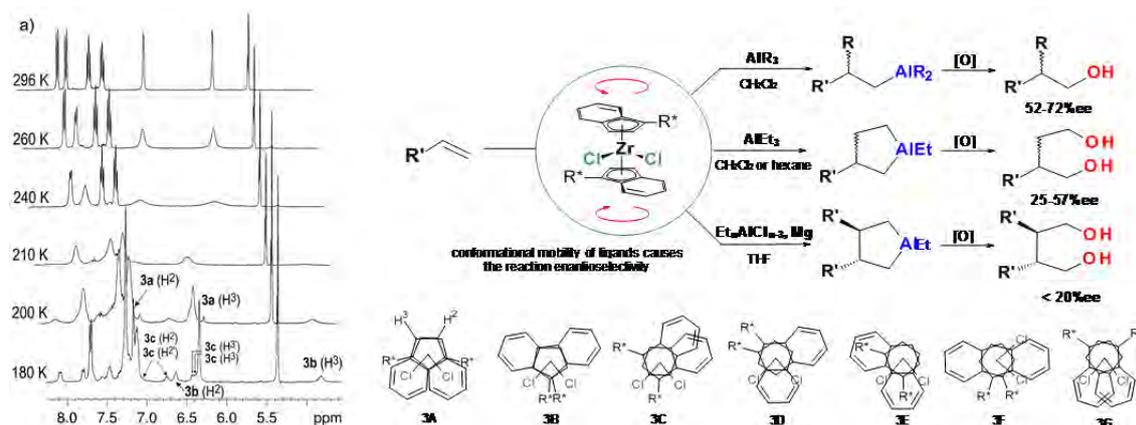
Mechanism of Olefin Cycloalumination with Triethylaluminium into Aluminacyclopentanes Using Cp_2ZrCl_2 as a Catalyst



The publications present the results on the experimental and theoretical studies of the role of Zr,Al-bimetallic intermediates in the alkene cycloalumination, catalyzed with zirconium η^5 -complexes. The factors that determine the intermediate reactivity and, consequently, the activity of the catalytic systems and reaction pathway are considered. The contribution of intermolecular processes of σ -ligand exchange between the transition and nontransition metal atoms in the formation of catalytically active centers is discussed. Thus, the mechanism of catalytic alkene cycloalumination is proposed.

- Халилов Л.М., Парфенова Л.В., Русаков С.В., Ибрагимов А.Г., Джемилев У.М., *Изв. АН, Сер. хим.*, **2000**, 12, 2086-2093.
- Khalilov L.M., Parfenova L.V., Rusakov S.V., Balaev A.V., Dzhemilev U.M. In «*Trends in Organometallic Chemistry Research*». Ed. Cato M.A.– NY: Nova Science Pub., **2005**, 55–72.
- Parfenova L.V., Berestova T.V., Molchankina I.V., Khalilov L.M., Whitby R.J., Dzhemilev U.M., *J. Organomet. Chem.*, **2013**, 726, 37-45. DOI:10.1016/j.jorganchem.2012.12.004.

Mechanism of asymmetric induction in enantioselective alkene carbo- and cycloaluminumation



The effect of a solvent nature on the rate of intramolecular exchange between conformers of neomenthyl-substituted zirconocenes, which are formed as a result of the rotation of the indenyl fragments relative to $[\text{ZrCl}_2]$, has been shown for the first time by the means of DNMR spectroscopy. A theoretical study on the possible rotamers of the conformationally non-rigid catalytically active centers was carried out. Comparison of the conformer composition and dynamics of the complexes with their activity and stereoselectivity in the reactions of OACs with alkenes led to the conclusion that the enantioselectivity of the reactions is determined by the kinetic factor, namely, by the rate of interaction in a pair: conformer of catalytically active center - substrate. Thus, in order to achieve high enantioselectivity in the studied reactions the catalyst molecule should have a specific conformational mobility for the formation of a suitable rotamer, which lifetime will be sufficient for the alkene insertion.

- Parfenova L.V., Berestova T.V., Tyumkina T.V., Kovyazin P.V., Khalilov L.M., Whitby R.J., Dzhemilev U.M. Enantioselectivity of chiral zirconocenes as catalysts in alkene hydro-, carbo- and cycloaluminumation reactions // *Tetrahedron Asymmetry*. - 2010. - V.21. - No.3. - P. 299-310.
- Parfenova L.V., Kovyazin P.V., Tyumkina T.V., Berestova T.V., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. Asymmetric alkene cycloaluminumation by AlEt_3 , catalyzed with neomenthylindenyl zirconium η^5 -complexes // *J. Organomet. Chem.*- 2013.- V.723.-P.19-25. DOI:10.1016/j.jorganchem.2012.10.021
- Parfenova L.V., Kovyazin P.V., Tyumkina T.V., Makrushina A.V., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. Catalytic Enantioselective Ethylaluminumation of Terminal Alkenes: Substrate Effect and Absolute Configuration Assignment// *Tetrahedron Asymmetry*. - 2015.- V. 26.- P. 124-135. DOI: 10.1016/j.tetasy.2014.11.019

ГРАНТЫ

INTAS №99-3-1541;

Royal Society Short Visit joint research project with the University of Southampton, 2006;

РФФИ № 95-03-09807_a, 98-03-32912_a, 05-03-97912_p_агидель_a, 08-03-97010-p_поволжье_a, 11-03-00210_a, 12-03-33089_мол_a_вед, 15-03-03227_a, 16-33-00162_мол_a, 16-33-60203_мол_a_дк;

Госконтракт (Минобрнауки РФ) №8426.

ПУБЛИКАЦИИ

1. Khalilov L.M., Parfenova L.V., Rusakov S.V., Balaev A.V., Dzhemilev U.M. Mechanism of Olefin Cycloalumination with Triethylaluminium into Alumina-cyclopentanes Using Cp_2ZrCl_2 as a Catalyst.// В кн. «Trends in Organometallic Chemistry Research». Ed. Cato M.A.– NY: Nova Science Pub.– 2005. – P.55–72.
2. Исламова Р.М., Пузин Ю.И., Юмагулова Р.Х., Фатыхов А.А., Парфенова Л.В., Джемилев У.М., Монаков Ю.Б. Влияние дициклопентадиен- и диинденцирконоцендихлоридов на радикальную полимеризацию метилметакрилата // *Высокомолекулярные соединения. А.* - 2006. - Т.48, №7. - С. 1101-1107. DOI: 10.1134/S0965545X06070078.
3. Parfenova L.V., Balaev A.V., Gubaidullin I.M., Pechatkina S.V., Abzalilova L.R., Spivak S.I., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. Kinetic Model of Olefins Hydroalumination by $HALBu^i_2$ and $AlBu^i_3$ in Presence of Cp_2ZrCl_2 Catalyst // *Int. J. Chem. Kinet.*- 2007.- v.39, No 6.- p.333-339. DOI: 10.1002/kin.20238.
4. Pankratyev E. Yu., Tyumkina T. V., Parfenova L. V., Khalilov L. M., Khursan S. L., Dzhemilev U. M. DFT Study on Mechanism of Olefin Hydroalumination by $XAlBu^i_2$ in the Presence of Cp_2ZrCl_2 Catalyst. I. Simulation of Intermediate Formation in Reaction of $HALBu^i_2$ with Cp_2ZrCl_2 // *Organometallics.*- 2009.- V. 28, № 4.-P. 968 – 977, DOI: 10.1021/om800393j.
5. Parfenova L.V., Gabdrakhmanov V.Z., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. On Study of Chemoselectivity of Reaction of Trialkylalanes with Alkenes, Catalyzed with Zr π -Complexes// *J. Organomet. Chem.*-2009.-v.694.-No.23- P.3725-3731. DOI: 10.1016/j.jorganchem.2009.07.037.
6. Parfenova L.V., Berestova T.V., Tyumkina T.V., Kovyazin P.V., Khalilov L.M., Whitby R.J., Dzhemilev U.M. Enantioselectivity of chiral zirconocenes as catalysts in alkene hydro-, carbo- and cycloalumination reactions // *Tetrahedron Asymmetry.* - 2010. – V.21. - No.3. - P. 299-310. DOI: 10.1016/j.tetasy.2010.01.001.
7. Pankratyev E. Yu., Tyumkina T. V., Parfenova L. V., Khalilov L. M., Khursan S. L., Dzhemilev U. M. DFT and Ab initio Study on Mechanism of Olefin Hydroalumination by $XAlBui_2$, in the Presence Cp_2ZrCl_2 Catalyst. II. Olefin Interaction with Catalytically Active Centers. // *Organometallics.*-2011. – V. 30. –P. 6078–6089. DOI: 10.1021/om200518h.
8. Парфенова Л.В., Халилов Л.М., Джемилев У.М. Механизмы реакций алюминийорганических соединений с олефинами и ацетиленами, катализируемых комплексами циркония// *Успехи химии (Russ. Chem. Rev.)*.- 2012.- Т. 81.- №6.-С.524-548. DOI: 10.1070/RC2012v081n06ABEH004225.
9. Parfenova L.V., Kovyazin P.V., Tyumkina T.V., Berestova T.V., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. Asymmetric alkene cycloalumination by $AlEt_3$, catalyzed with neomenthylindenyl zirconium η^5 -complexes // *J. Organomet. Chem.*- 2013.- V.723.-P.19-25. DOI:10.1016/j.jorganchem.2012.10.021.
10. Parfenova L.V., Berestova T.V., Molchankina I.V., Khalilov L.M., Whitby R.J., Dzhemilev U.M. Stereocontrolled Monoalkylation of Mixed-Ring Complex $CpCp'ZrCl_2$ ($Cp' = 1$ -neomenthyl-4,5,6,7-tetrahydroindenyl) by Lithium, Magnesium and Aluminium Alkyls// *J. Organomet. Chem.* – 2013.- V.726.- P.37-45. DOI:10.1016/j.jorganchem.2012.12.004.
11. Parfenova L.V., Berestova T.V., Kovyazin P.V., Yakupov A.R., Mesheryakova E.S., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. Catalytic cyclometallation of allylbenzenes by $EtAlCl_2$ and Mg as new route to synthesis of dibenzyl butane lignans// *J. Organomet. Chem.* – 2014.-V.772-773.-P.292-298. DOI: 10.1016/j.jorganchem.2014.09.033.
12. Parfenova L.V., Kovyazin P.V., Tyumkina T.V., Makrushina A.V., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. Catalytic Enantioselective Ethylalumination of Terminal Alkenes: Substrate Effect and Absolute Configuration Assignment// *Tetrahedron Asymmetry.* – 2015.- V. 26.- P. 124-135. DOI: 10.1016/j.tetasy.2014.11.019.
13. Parfenova L.V., Kovyazin P.V., Nifant'ev I.E., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. Role of Zr,Al-Hydride Intermediate Structure and Dynamics in Alkene Hydroalumination by $XAlBui_2$ ($X = H, Cl, Bui$), Catalyzed with Zr η^5 -Complexes// *Organometallics.*- 2015.- V.34 (14).- P. 3559–3570. DOI: 10.1021/acs.organomet.5b003.

СТРУКТУРНАЯ ХИМИЯ ЦИКЛИЧЕСКИХ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ



Тюмкина Татьяна Викторовна,

к.х.н., доцент, старший научный сотрудник лаборатории структурной химии, ttvnmr@gmail.com.



Исламов Денис Насимович,

аспирант лаборатории структурной химии, islamov19@gmail.com.

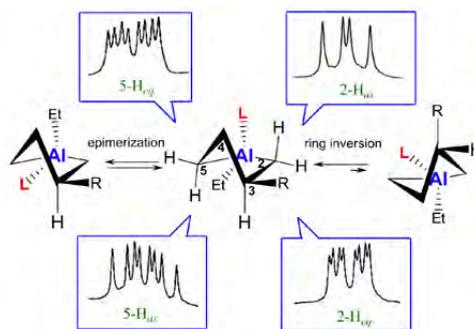
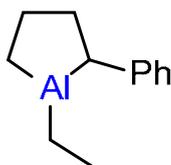
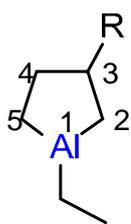


Идрисова Светлана Маратовна,

аспирант лаборатории структурной химии, svetochka-87@yandex.ru.

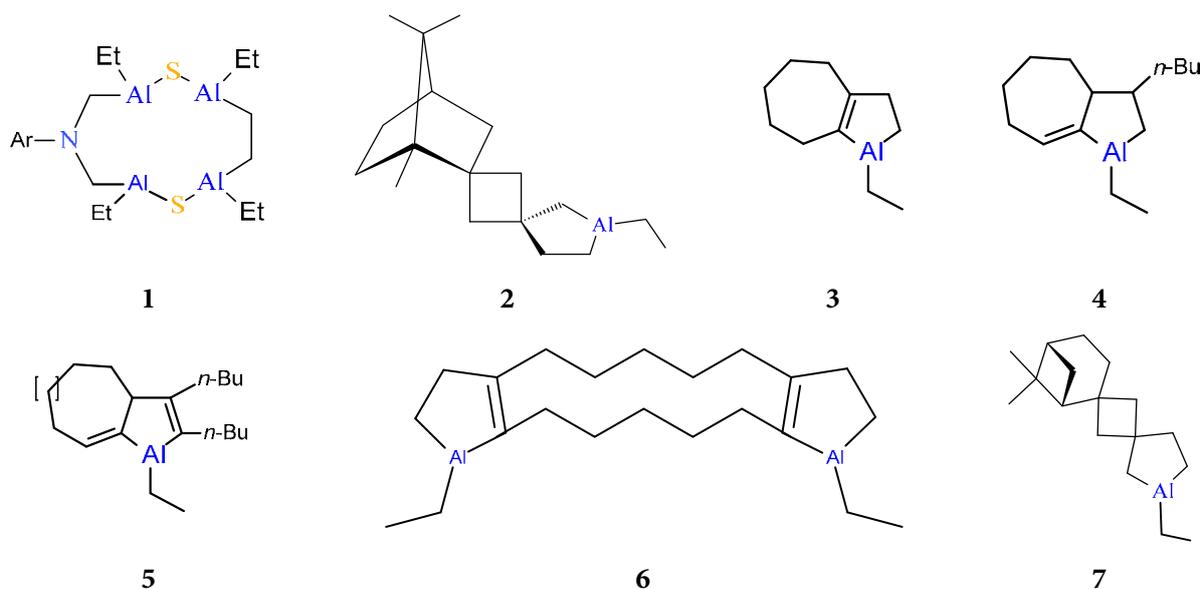
Alumolanes

The systematic structural analysis of cyclic organoaluminum compounds, 1-ethyl-3(R)-substituted alumolanes (R = *n*-Bu, *n*-Hex, *n*-Oct, *i*-Bu, Ph, Bn, SiEt₃, cyclohexenyl) and 1-ethyl-2-phenylalumolane in polar solvents (Et₂O, THF, pyridine), has been carried out by the means of NMR ¹H, ¹³C, ²⁷Al spectroscopy and quantum chemical methods (DFT, MP2). The NMR spectroscopic criteria for identification of alumolanes were established. Predominant conformation of the metallacycle as *twist* form with *pseudo-equatorial* location of a substituent was defined using experimental and theoretical approaches. The direct heteronuclear coupling constants *J* (¹H-¹³C) in alumolanes were found. Relative stability of the alumolane solvates has been determined on the basis of calculated thermodynamic parameters of complexation reaction and from the dependence of the ¹H, ¹³C, and ²⁷Al NMR chemical shifts of metallacycle atoms vs the solvent nature [1].



Aluminacycles

The structure of new aluminacycles, such as 4-aryl-2,6,8,11-tetraethyl-1,7-dithia-4-aza-2,6,8,11-tetraaluminacycloundecanes **1** [2], 1''-ethyl-(1,7,7-trimethyldispiro[bicyclo[2.2.1]heptane-2,1'-cyclobutane-3',3'']alumolane) **2** [3], 13-Ethyl-13-aluminabicyclo[10.3.0]pentadec-1(12)-ene **3** [4], 12-ethyl-10-*n*-butyl-12-aluminabicyclo[7.3.0^{1,9}]dodec-1(2)-ene **4** [5], 10,11-di-*n*-propyl-12-ethyl-12-aluminabicyclo[7.3.0^{1,9}]dodec-1(2),10(11)-ene **5** [6], 8,18-dialuminatricyclo[15.3.0^{1,17,7},11]-eicosa-1(17),7(11)diene (regioisomers) **6** [7], 1''-Ethyl-(6,6-dimethyldispiro[bicyclo[3.1.1]heptane-2,1'-cyclobutane-3',3'']alumolane) (regioisomers) **7** [3] was determined by means of multinuclear ¹H, ¹³C, ²⁷Al NMR spectroscopy.



ПУБЛИКАЦИИ

1. Tyumkina T.V., Islamov D.N., Parfenova L.V., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. Structure and conformations of 2-substituted and 3-substituted alumolanes in polar solvents: a direct NMR observation // *Magn. Reson. Chem* – 2016- 54, стр. 62–74. DOI: 10.1002/mrc.4311.
2. N.N. Makhmudiyarova, L.V. Mudarisova, T.V. Tyumkina, V.M. Yanybin, A.G. Ibragimov, U.M. Dzhemilev. First examples of the synthesis of macroaluminahetero(N,S)cycles with the participation of metallo(Ti,Zr)cene catalysts // *Tetrahedron Letters*.-2015.-V.56. – P.1112 – 1115. DOI:10.1016/j.tetlet.2015.04.089.
3. Vladimir A. D'yakonov, Regina A. Tuktarova, Ilgiz I. Islamov, Tatyana V. Tyumkina and Usein M. Dzhemilev One-pot Modification of Terpene's Methylenecyclobutane Derivatives // *Journal of Heterocyclic Chemistry*, 2015, DOI: 10.1002/jhet.2478.
4. В.А.Дьяконов, Л.Ф.Галимова, Т.В.Тюмкина, У.М.Джемилев, Циклоалюминирование циклоалкинов с помощью Et₃Al, катализируемое комплексами Zr // *ЖОрХ*, **2012**, Вып. 48. № 1, С. 9–15. DOI: 10.1134/S1070428012010010.
5. Timerkhanov R.K., Tyumkina T.V., Popod'ko N.R., Ibragimov A.G., Dzhemilev U.M. Combined cycloaluminum of cyclic 1,2-dienes and olefins with EtAlCl₂ in the presence of Cp₂ZrCl₂ catalyst // *Tetrahedron Lett.* – 2009. – V. 50. – p. 1270–1272. DOI: 10.1016/j.tetlet.2008.12.115.
6. Дьяконов В.А., Тимерханов Р.К., Тюмкина Т.В., Джемилев У.М. Совместное циклоалюминирование циклических 1,2-диенов, дизамещенных ацетиленов и терминальных алленов с помощью EtAlCl₂, катализируемое комплексами Ti и Zr // *Известия АН. Сер. хим.* – 2009. – № 12. – С. 2378–2385. DOI: 10.1007/s11172-009-0344-4.
7. Дьяконов В.А., Туктарова Р.А., Тюмкина Т.В., Халилов Л.М., Джемилев У.М. Синтез и превращения металлациклов. Сообщение 36. Циклоалюминирование циклических диацетиленов с помощью Et₃Al, катализируемое Cp₂ZrCl₂ // *Известия АН. Сер. хим.* – 2010. – № 10. – С. 1852–1858. DOI: 10.1007/s11172-010-0331-9.

**СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ, ЭЛЕМЕНТО- И
МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И УГЛЕРОДНЫХ КЛАСТЕРОВ**



Тулябаев Артур Радисович, к.х.н., м.н.с. лаборатории структурной химии (с 2011 г.), tulebeich@gmail.com.



Кирьянов Илья Игоревич, м.н.с. лаборатории структурной химии (с 2010 г.), ilya.lsc@gmail.com.

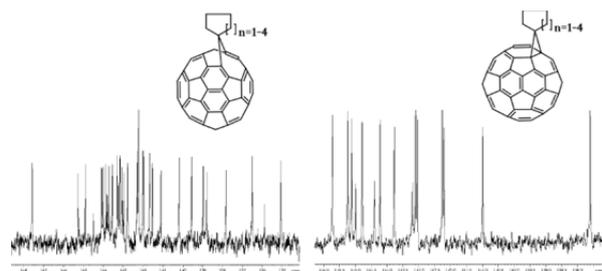


Мещерякова Екатерина Сергеевна, аспирант лаборатории структурной химии (с 2012 г.), katusha2974@gmail.com.



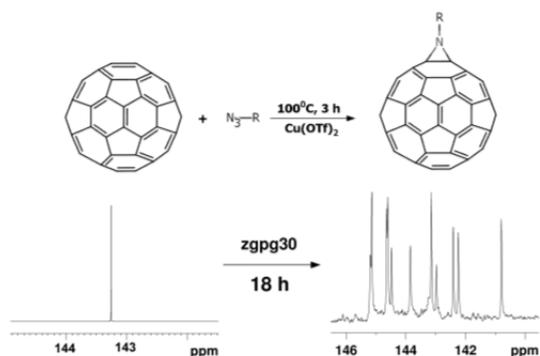
Мозговой Олег Сергеевич, аспирант лаборатории структурной химии (с 2015 г.), skill15@mail.ru.

Структурные исследования в ряду производных фуллерена C₆₀



The ¹H and ¹³C NMR chemical shifts of spirocycloalkylidene[60]fullerenes were assigned using experimental NMR data and the Density Functional Theory (DFT)–Gauge Independence Of Atomic Orbitals method (GAIO) calculation method in the Perdew Burke Ernzerhof (PBE)/3z approach. The calculated values of the ¹³C NMR chemical shifts adequately reproduce the experimental values at this quantum chemistry approach. Similar assignments will be helpful for ¹³C NMR spectral analysis of homo- and methano-[60]fullerene derivatives for structure elucidation and to determine the influence of fullerene frames on substituents and the influence of substituents on fullerene cores.

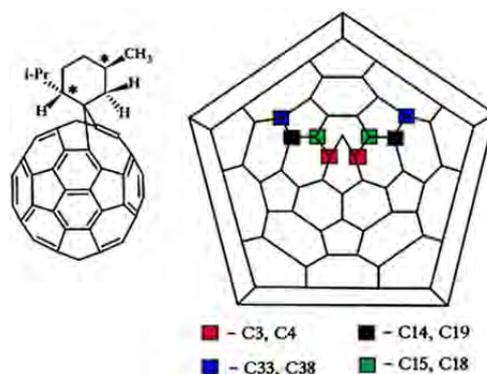
Khalilov L.M., Tulyabaev A.R., Yanybin V.M., Tuktarov A.R. *Magn. Reson. Chem.*, 2011, 49, 378–384, DOI: 10.1002/mrc.2756.



Синтез и особенности спектров ЯМР ¹³C N-замещенных азиридино[60]фуллеренов

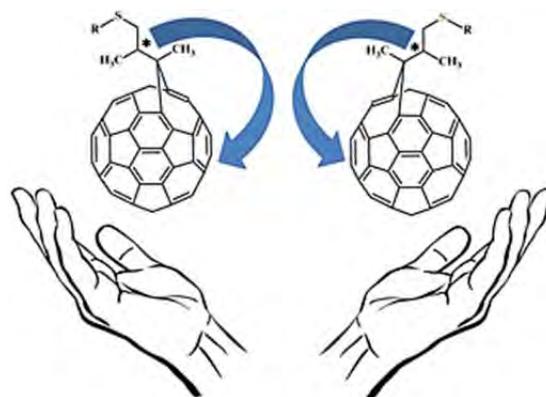
Разработан эффективный метод циклоприсоединения органических азидов к фуллерену C₆₀ под действием стехиометрических количеств Cu(OTf)₂ с получением индивидуальных азиридинофуллеренов. Среди синтезированных азиридинофуллеренов, обладающих локальной C_{2v}-симметрией фуллеренового каркаса, лишь для соединения с алмазным присоединенным фрагментом соблюдается «правило симметрии» при оценке числа сигналов в спектре ЯМР ¹³C. Для остальных соединений обнаружено неожиданное уменьшение числа сигналов в спектрах ЯМР ¹³C до 11. Квантово-химическим методом инвариантных атомных орбиталей (GAIO) с функционалом PBE и трехрасщепленным базисным набором 3ζ проведен расчет химических сдвигов в спектрах ЯМР ¹³C и обсуждены возможные причины совпадения сигналов.

Халилов Л. М., Тулябаев А. Р., Ахметов А. Р., Туктаров А. Р. *Изв. АН, Сер. Хим.*, 2015, 64, 2725–2730.



¹H and ¹³C NMR chemical shift predictions of homo- and methano[60]fullerenes containing chiral centers in attached fragment were made using the two-dimensional NMR technique (HH COSY, ¹H–¹³C HSQC and HMBC) and the quantum chemistry GIAO calculation method in the PBE/3ζ approach. The influence of a chiral substituent on the ¹³C chemical shifts of diastereotopic fullerene carbons was estimated by comparing the calculated and experimental ¹³C NMR spectra. The resonances of the fullerene carbons in α-, β- and δ-positions relative to the position of the substituent exhibit the greatest diastereotopic splitting.

Khalilov L.M., Tulyabaev A.R., Tuktarov A.R. *Magn. Reson. Chem.*, 2011, 49, 768–774, DOI: 10.1002/mrc.2809.



Diastereotopic splitting in the ¹³C NMR spectra of sulfur homofullerenes and methanofullerenes with chiral fragments

Using gauge-invariant atomic orbital PBE/3ζ quantum chemistry approach, ¹³C NMR chemical shifts and diastereotopic splittings of sp² fullerene carbons of a number of sulfur homofullerenes and methano-fullerenes have been predicted and discussed. An anisochrony of fullerene carbons is caused by a chiral center of attached moieties. Clearly distinguishable diastereotopic pairs (from 8 to 11) of fullerene carbons of homofullerenes were observed. Unambiguous assignments of ¹³C NMR chemical shifts were performed, and diastereotopic splittings of methano-fullerenes were observed for α, β and γ to a functionalization site.

Tulyabaev A.R., Tuktarov A.R., Khalilov L.M. *Magn. Reson. Chem.*, 2014, 52, 3–9. DOI: 10.1002/mrc.4027.

FULLERENES

Chemistry, Natural Sources and Technological Applications



SHANNON B. ELLIS
EDITOR

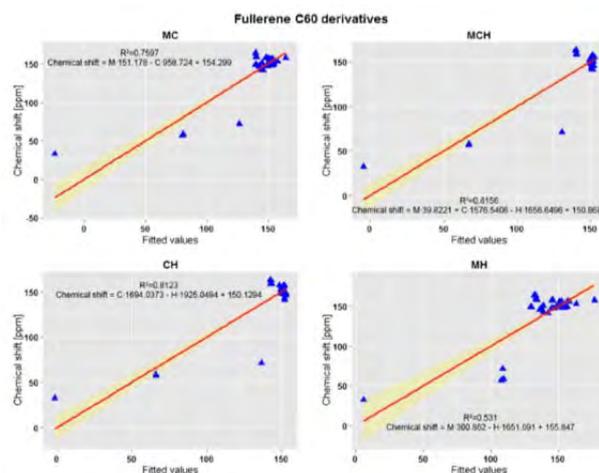
¹³C NMR in Fullerene Chemistry: Structure/Shift Relationship and Quantum-Chemical Predictions

In this chapter, the results of the examination of the relationship between the ¹³C NMR chemical shift and structure of fullerenes including their higher derivatives are summarized and discussed. These compounds are mono-adducts from [2+n] cycloaddition (where n=1-4), as well as those obtained by diverse radical and nucleophilic addition reactions. It is also an attempt to review a worldwide and own experience in the use of the quantum chemistry approaches to calculate and ascribe the signals in the ¹³C NMR spectra of fullerene derivatives.

Tulyabaev A.R., Khalilov L.M. "Fullerenes: Chemistry, Natural Sources and Technological Applications". Nova Science Publishers, Inc. New-York, 2014, 95-122, ISBN: 978-1-63321-386-9

ГРАНТЫ

- РФФ 14-13-00296 (2014-2016). Синтез и электронные свойства функционально-замещенных фуллеренов – наноразмерные оптические молекулярные переключатели», руководитель д.х.н., проф. Халилов Л.М.
- РФФИ №15-03-02487а (2015-2017) «Разработка метода прогнозирования химических сдвигов ЯМР ¹³C с использованием искусственных нейронных сетей и установление структуры новых производных фуллерена C₆₀», рук. д.х.н., проф. Халилов Л.М.



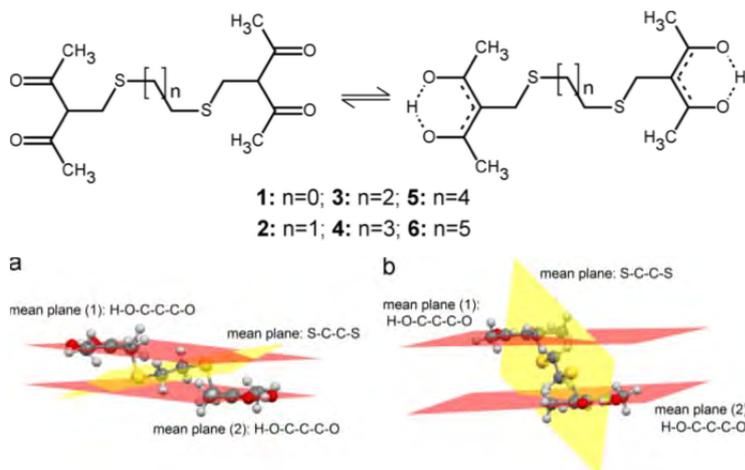
Mulliken population analysis (MPA), Hirshfeld population analysis (HPA), ChargeModel 5 (CM5) and Hu Lu Yang charge fitting method (HLY) were considered in order to reveal influence of atomic partial charges on the ¹³C NMR chemical shifts. The test set included seven classes of organic molecules. Partial charges of carbon atoms were obtained from quantum-chemical calculations at DFT/HISS level. Linear regressions were constructed as estimators of accuracy of each model. The best approach was shown by multivariate regression with MPA, HPA, and CM5 charges as predictors in a linear model with mean value of R²=0.8917.

Kiryanov I. I., Mukminov F. H., Tulyabaev A. R., Khalilov L. M. *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, 2016, 152, 62–68
DOI:10.1016/j.chemolab.2016.01.010

ПУБЛИКАЦИИ

1. Tulyabaev A.R., Khalilov L.M. ^{13}C NMR in Fullerene Chemistry: Structure/Shift Relationship and Quantum-Chemical Predictions, "Fullerenes: Chemistry, Natural Sources and Technological Applications". Nova Science Publishers, Inc. New-York, 2014, 95-122. ISBN: 978-1-63321-386-9.
2. Туктаров А.Р., Королев В.В., Тулябаев А.Р., Яныбин В.М., Халилов Л.М., Джемилев У.М. Циклоприсоединение циклических диазосоединений к фуллерену C_{60} в присутствии Pd-содержащего комплексного катализатора // *Изв. АН, Сер. Хим.*, 2010, 59, 956-962. DOI:10.1007/s11172-010-0193-1.
3. Khalilov L.M., Tulyabaev A.R., Yanybin V.M., Tuktarov A.R. ^1H and ^{13}C NMR chemical shift assignments of spiro-cycloalkylidenehomo- and methanofullerenes by the DFT-GIAO method // *Magn. Reson. Chem.*, 2011, 49, 378-384. DOI: 10.1002/mrc.2756.
4. Khalilov L.M., Tulyabaev A.R., Tuktarov A.R. Homo- and methano-[60]fullerenes with chiral attached moieties – ^1H and ^{13}C NMR chemical shift assignments and diastereotopicity effects // *Magn. Reson. Chem.*, 2011, 49, 768-774. DOI: 10.1002/mrc.2809.
5. Tulyabaev A.R., Khalilov L.M. On accuracy of the ^{13}C NMR chemical shift GIAO calculations of fullerene C_{60} derivatives at PBE/3z approach // *Comput. Theor. Chem.*, 2011, 976, 12-18. DOI:10.1016/j.comptc.2011.07.031.
6. Tuktarov A.R., Korolev V.V., Tulyabaev A.R., Popod'ko N.R., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. Synthesis of optically active spiro homo- and methanofullerenes // *Tetrahedron Lett.*, 2011, 52, 834-836. DOI:10.1016/j.tetlet.2010.12.049.
7. Tulyabaev A.R., Tuktarov A.R., Khalilov L.M. Diastereotopic splitting in the ^{13}C NMR spectra of sulfur homofullerenes and methanofullerenes with chiral fragments // *Magn. Reson. Chem.*, 2014, 52, 3-9. DOI: 10.1002/mrc.4027.
8. Халилов Л. М., Тулябаев А. Р., Ахметов А. Р., Туктаров А. Р. Синтез и особенности спектров ЯМР ^{13}C N-замещенных азиридино[60]фуллеренов // *Изв. АН, Сер. Хим.*, 2015, 64, 2725-2730.
9. Airat R Tuktarov · Artur A. Khuzin · Leonard M. Khalilov · Artur R. Tulyabaev · Arslan R. Akhmetov · Usein M. Dzhemilev. Synthesis of [60]fulleropyrrolidine-dithienyethene conjugates and DFT calculations of their photochromic properties // *Mendeleev Commun.* 2015, 25(6), 470, DOI: 10.1016/j.mencom.2015.11.02.
10. Kiryanov I. I., Mukminov F. H., Tulyabaev A. R., Khalilov L. M. Prediction of ^{13}C NMR chemical shifts by artificial neural network. I. Partial charge model as atomic descriptor // *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, 2016, 152, 62-68. DOI:10.1016/j.chemolab.2016.01.010.

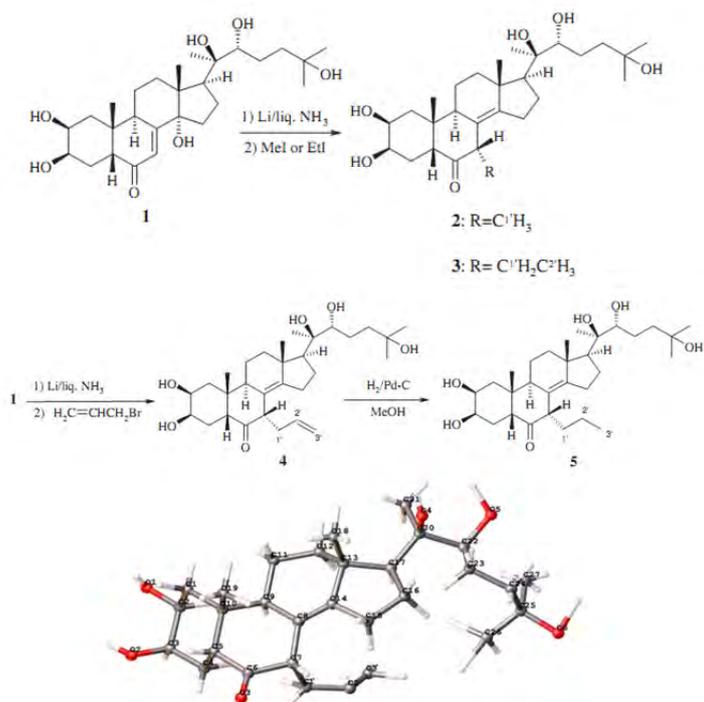
Природа четно-нечетных эффектов кристаллизации: ЯМР и РСА



The relationships between structural features and crystallization of the C1-C6 α,ω -bis-(pentane-2,4-dione-3-yl-methyl-sulfanyl)alkanes are considered. It was shown that the conjugated enol *bis*-pentadiones which form pseudo six-membered rings and stabilized by intramolecular hydrogen bonds favor the crystallization. Using a polarized optical technique, it has been found that crystallization rate of the melts of crystalline compounds decreases with elongation of the aliphatic chain between sulfur atoms. It is assumed that one of the main factors that contributes to probability to form single crystals is a small twist angle between two pseudo six-membered rings.

- Khalilov L. M., Tulyabaev A. R., Mescheryakova E. S., Akhmadiev N. S., Timirov Y. I., Skaldin O. A., Akhmetova V. R. Structure of α,ω -bis-(pentane-2,4-dione-3-ylmethylsulfanyl)alkanes and even/odd crystallization effects // *J. Cryst. Growth*, 2015, 426, 214-220. DOI:10.1016/j.jcrysgro.2015.06.008

MP- структурные исследования природных и полусинтетических экистероидов

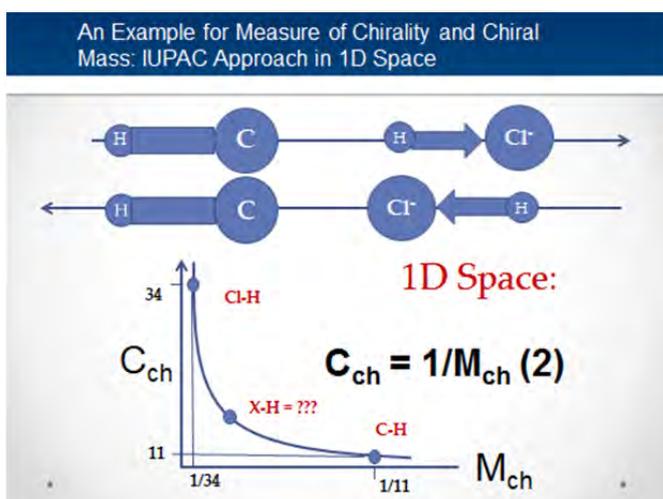


Stereochemical identification of C7 alkylation of 20-hydroxyecdysone

The reaction of 20-hydroxyecdysone with methyl or ethyl iodide or allyl bromide in a lithium–ammonia solution results in stereospecific 7a-alkylation to give 7a-methyl-, 7a-ethyl-, and 7a-allyl-14-deoxy- $\Delta^{8(14)}$ -20-hydroxyecdysones, respectively. By catalytic hydrogenation (Pd-C/MeOH), the 7a-allyl derivative was converted to 7a-n-propyl-14-deoxy- $\Delta^{8(14)}$ -20-hydroxyecdysone. Structural identification was performed by X-RAY, NMR ^1H and ^{13}C .

I.V. Galyautdinov, Z.R. Khairullina, E.R. Zaripova, V.P. Sametov, E.S. Mescheryakova, Z.S. Muslimov, O.S. Mozgovoy, L.M. Khalilov V.N. Odinkov. Stereospecific 7a-alkylation of 20-hydroxyecdysone in a lithium–ammonia solution // *Steroids*, 2015, Vol. 98, pp. 122–125.

Symmetry, inertness and chirality in theory of chiral systems



The measure of the chiral system inertia has been suggested as a reciprocal value of degree of chirality. Three main laws of conservation, evolution, and interaction of chiral systems in the inertial space are formulated. Some of the consequences concerning the interaction of the chiral elements could be used to estimate the degree of chirality of complex chiral systems.

L.M. Khalilov // *Foundations of Chemistry*, 2015, 17: pp.129–135, DOI 10.1007/s10698-015-9231-2



ЛАБОРАТОРИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ АНАЛИЗА УФИМСКОГО ИНСТИТУТА ХИМИИ РАН



Заведующий лабораторией:

к.х.н., старший научный сотрудник Спирихин Леонид Васильевич.

Контактные сведения:

Почт. адрес: 450054, г. Уфа, проспект Октября, д.71

E-mail: spectr@anrb.ru

Телефон: +7(347) 235-61-19

Факс: +7(347) 235-60-66

Сайт: w3.chem.ru/lpcma

Лаборатория физико-химических методов анализа УФИХ РАН создана в январе 2006 года путем слияния трех лабораторий Института органической химии Уфимского научного центра РАН. В состав лаборатории входит пять групп: группа оптической спектроскопии и ЭПР; группа хроматографии; группа ЯМР спектроскопии; группа масс-спектрометрии; группа элементного анализа.

Основные направления исследований:

- изучение структуры широкого круга органических, элементоорганических, биоорганических и природных соединений;
- идентификация и количественное определение состава и структуры целевых и промежуточных продуктов органического синтеза;
- исследование микроструктуры полимеров и сополимеров;
- изучение стереохимической структуры, определение трехмерного строения молекул и конформационный анализ;
- исследование динамических процессов, измерение скоростей химических реакций и диффузионные эксперименты.



Сотрудники группы ЯМР спектроскопии (слева направо): (на переднем плане) Ерастов А.С., Фатыхов А.А., Байкова И.П., Галкин Е.Г., Спирихин Л.В., Акчурина О.В., Лобов А.Н., Терегулов И.Х.; (на заднем плане) Салихов Ш.М., Муслухов Р.Р., Еличев А.А. (март 2013 г).

В распоряжении лаборатории имеется спектрометры:

- ЭПР спектрометр Radiopan SE/X 2544 3000 ГГц (1986, Польша)
- ЯМР спектрометр Bruker AM 300 MHz, (1988, Германия);
- ЯМР спектрометр Bruker AMX 300 MHz, (1998, Германия);
- ЯМР спектрометр Bruker Avance-III 500 MHz (2010, Германия);

Возможности приборного парка

- регистрация ^1H ЯМР спектров (300 МГц, 500 МГц)
- регистрация ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P ЯМР спектров (300 МГц, 500 МГц)
- регистрация одномерных спектров ЯМР на ядрах ^2H , ^{11}B , ^{13}C , ^{14}N , ^{15}N , ^{19}F , ^{29}Si , ^{31}P , ^{77}Se , ^{195}Pt (500 МГц)
- регистрация двумерных спектров ЯМР COSY, NOESY, ROESY, TOCSY, HSQC, HMBC, HMQC на ядрах ^1H , ^{11}B , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{29}Si , ^{31}P (500 МГц)
- регистрация спектров при различных температурах, с использованием температурной приставки (от -150 до $+120^\circ\text{C}$)
- релаксационные измерения (T_1 , T_2)

Трехканальный ЯМР спектрометр высокого разрешения Bruker Avance III 500MHz

	BBFOplus- двухканальный широкополосный датчик
	Внутренняя катушка: от ^{31}P до ^{15}N , ^{19}F Внешняя катушка: развязка и наблюдение ^1H Z-градиент поля, ^2H -канал Автоматическая настройка амплитудно-частотной характеристики канала (ATM); Высокая чувствительность по гетероядрам; Чувствительность по ^1H 1:750
	ТВБ - трехканальный инверсный датчик
	Внутренняя катушка: развязка и наблюдение ^1H , развязка ^{13}C ; Внешняя катушка: развязка на гетероядрах (от ^{107}Ag до ^{15}N) Z-градиент поля, ^2H -канал; Одновременное наблюдение трех ядер: ^1H , ^{13}C и X ; Чувствительность по ^1H 1:900

Местоположение: 450054, г. Уфа, проспект Октября, д.71 (д.69)



**Сотрудники группы ЯМР спектроскопии
лаборатории ФХМА УФИХ РАН**



Спирихин Леонид Васильевич.
к.х.н., старший научный сотрудник,
заведующий лабораторией физико-
химических методов анализа Уфимского
Института химии РАН;
комн.: 07 (адм.к.); spectr@anrb.ru;
Тел.: +7(347)2356119; внут. тел.: 7-71;
Область научных интересов: ЯМР
спектроскопия и стереохимические
аспекты строения органических и
биоорганических молекул.



Байкова Ирина Петровна.
к.х.н., научный сотрудник;
комн.: 011 (адм.к.); poljr@anrb.ru;
Тел.: +7(347)2356119; внут. тел.: 5-77;
Область научных интересов:
хиральные шифт-реагенты для
установления
энантиостереоселективности реакции
циклопропан производных, структуры
комплексов при экстракции
благородных металлов S и N
содержащими различными лигандами.



Шишлов Николай Михайлович
к.х.н., старший научный сотрудник,
руководитель группы оптической
спектроскопии и ЭПР;
комн.: 045 (лаб.к.); shishlov@anrb.ru;
Тел.: +7(347)2356119; внут. тел.: 3-90 (5-
18);
Область научных интересов: ЭПР
спектроскопия, структура
полиарилсульфогталидов,
органические магнетики на основе
радикалов триарилметильного типа.



Акчурина Оксана Владимовна.
к.х.н., научный сотрудник;
комн.: 011 (адм.к.);
gin352006@yandex.ru;
Тел.: +7(347)2356119; внут. тел.: 5-77;
Область научных интересов:
Установление пространственной
структуры органических молекул с
помощью спектроскопии ЯМР.



Фатыхов Ахнэф Амирович.
к.х.н., старший научный сотрудник;
комн.: 07 (адм.к.); affa@anrb.ru;
Тел.: +7(347)2356119; внут. тел.: 7-71;
Область научных интересов: Строение
гетероциклических органических S, N,
O-содержащих соединений, состав и
свойства высокотемпературостойких
полириленфталидных полимеров, ЯМР-
релаксация.



Еличев Александр Анатольевич.
ведущий электронщик;
комн.: 09 (адм.к.); yeaa@anrb.ru;
Тел.: 8(347)2356119; внут. тел.: 5-77;
Область интересов: автоматизация
научного процесса, ЯМР-сервис.



Муслухов Ринат Рафаисович.
к.х.н., старший научный сотрудник;
комн.: 07 (адм.к.); spectr@anrb.ru;
Тел.: +7(347)2356119; внут. тел.: 7-71;
Область научных интересов: Структура
и стереоизомерия металлоорганических
соединений Mg и Al и продуктов
каталитических реакций с участием
МОС. Строение (co)полимеров
различного строения и продуктов
полимераналогичных превращений ряда
диеновых полимеров.



Орехов Валерий Петрович.
ведущий электронщик;
комн.: 08X (адм.к.); ovp@ufanet.ru;
Тел.: +7(347)2356119; внут. тел.: 5-77;
Область интересов: программное
обеспечение научного процесса, ЯМР-
сервис.



Салихов Шамиль Мубаракovich.

к.х.н., старший научный сотрудник;
комн.: 07 (адм.к.); salikhov@anrb.ru;
Тел.: +7(347)2356119; внут. тел.: 7-71;

Область научных интересов: химия терпенов, углеводов, гетероциклических бензоксазинов. Разработка подходов к аналогам противоопухолевых соединений на основе доступных дитерпеноидов. ЯМР исследования макро- и гетероциклических соединений.



Терегулов Искандар Хасанovich.

к.х.н., ведущий электронщик
комн.: 08 (адм.к.); interreg@anrb.ru
Тел.: +7(347)2356119; внут. тел.: 5-77 (7-71)

Область научных интересов: физическая химия (химически индуцированная динамическая поляризация ядер), радиоспектроскопия, разработка аппаратно-програмного обеспечения автоматизации научных исследований, прикладное программирование систем реального времени.



Лобов Александр Николаевич.

к.х.н., старший научный сотрудник;
комн.: 07 (адм.к.); lobovan@anrb.ru;
Тел.: +7(347)2356119; внут. тел.: 7-71;

Область научных интересов: структура органических соединений по данным спектроскопии ЯМР и *ab initio* квантово-химических расчетов. Соединения ди- и тритерпеноидной природы, модифицированные производные алкалоидов, а также азотсодержащие гетероциклы. Кинетические и диффузионные эксперименты, ЯМР-релаксация.

Основные публикации за 2015 г.

- L. A. Baeva, A. A. Fatykhov, E. G. Galkin, N. K. Lyapina. Synthesis of 1,5,9-trimethyl-6-thia-2-azabicyclo[3.2.2]nonan-3-one by the Ritter reaction.// *Russ. J. Org. Chem.*– 2014.– Vol.50.– Is.12.– P.1851-1852. DOI: 10.1134/S1070428014120276
- E. M. Chainikova, A. N. Teregulova, A. N. Lobov, A. S. Erastov, R. L. Safiullin. A simple one-pot preparation of 3,3a-dihydro-5H-pyrano[3,3a-c]isoxazol-5-ylideneethanal from 4-vinyloxyphenyl azide: an example of aromatic azide photooxidation for the synthesis of nitrogen-containing heterocyclic compounds.// *Tetrahedron Letters*.– 2015.– Vol.56.– Is.11.– P.1332-1334. DOI: 10.1016/j.tetlet.2015.02.014
- I.P. Tsypysheva, A.N. Lobov, A.V. Kovalskaya, P.R. Petrova, S.P. Ivanov, Sh.A. Rameev, S.S. Borisevich, R.L. Safiullin, M.S. Yunusov. Aza-Michael reaction of 12-N-carboxamide of (–)-cytisine under high pressure conditions. // *Nat. Prod. Res.*– 2015.– Vol.29.– Is.2.– P.141-148. DOI: 10.1080/14786419.2014.968150
- G. F. Vafina, A. R. Uzbekov, L. V. Spirikhin, F. Z. Galin, M. S. Yunusov. Synthesis of Sulfur-Containing Quinopimaric Acid Scaffold Derivatives.// *Chem. Nat. Comp.*– 2015.– Vol.51.– Is.1.– P.91-96. DOI: 10.1007/s10600-015-1210-2
- A. M. Gimazetdinov, V. V. Loza, L. V. Spirikhin, A. Z. Almukhametov, M. S. Miftakhov. Hydroxy-directed Prins cyclizations. Synthesis of the bowl-type chiral tricyclic cyclopentanoids, bicyclic pyranes, and furanes.// *Tetrahedron: Asymmetry*.–2015.– Vol.26.– Is.12-13.– P.608-612. DOI: 10.1016/j.tetasy.2015.04.014
- E. M. Chainikova, A. N. Teregulova, A. N. Lobov, A. S. Erastov, R. L. Safiullin. A simple one-pot preparation of 3,3a-dihydro-5H-pyrano[3,3a-c]isoxazol-5-ylideneethanal from 4-vinyloxyphenyl azide: an example of aromatic azide photooxidation for the synthesis of nitrogen-containing heterocyclic compounds.// *Tetrahedron Letters*.– 2015.– Vol.56.– Is.11.– P. 1332-1334. DOI: 10.1016/j.tetlet.2015.02.014
- I. P. Tsypysheva, S. S. Borisevich, A. N. Lobov, A. V. Kovalskaya, V. V. Shamukaev, R. L. Safiullin, S. L. Khursan. Inversion of diastereoselectivity under high pressure conditions: Diels–Alder reactions of 12-N-substituted derivatives of (–)-cytisine with N-phenylmaleimide.// *Tetrahedron: Asymmetry*.– 2015.– Vol.26.– Is.14.– P.732-737. DOI: 10.1016/j.tetasy.2015.06.005
- M. S. Babaev, A. I. Vorob'eva, Yu. S. Chernysheva, O. V. Zakir'yanova, L. V. Spirikhin, and S. V. Kolesov. Microparticles of Poly-N,N-diallyl-N,N-dimethylammonium Chloride Polyelectrolyte Complexes as Drug Carriers.// *Russ. J. Appl. Chem.*– 2015.– Vol.88.– Is. 9.– P.1494–1499. DOI: 10.1134/S1070427215090177
- G. Yu. Ishmuratov, Yu. V. Legostaeva, L. R. Garifullina, R. R. Muslukhov, L. P. Botsman, G. G. Kozlova. Ozonolytic Transformation of (S)-(-)-Limonene in HCl-Isopropanol.// *Chem. Nat. Compd.*– 2015. Vol.51.– Is.1.– P.71-73. DOI: 10.1007/s10600-015-1206-y
- E. F. Khusnutdinova, N. I. Medvedeva, D. V. Kazakov, O. S. Kukovinets, A. N. Lobov, K. Yu. Suponitsky, O. B. Kazakova. An efficient synthesis of moronic and heterobetulonic acids from allobetulin.// *Tetrahedron Letters*.– 2016.– Vol.57.– Is.1.– P.148-151. DOI: 10.1016/j.tetlet.2015.11.086
- N. M. Shishlov, S. L. Khursan. Electron traps in poly(diphenylene phthalide) and poly(diphenylene sulfophthalide). Experimental manifestations and quantum chemical analysis.// *Russ. Chem. Bull.*– 2015.– Vol.64.– Is.4.– P.766-790. DOI: 10.1007/s11172-015-0933-3
- Shishlov N. M., Akhmetzyanov Sh. S., Khursan S. L. Generation of stable carbocations in polydiphenylenesulfophthalide and ortho-substituted polytriarylcarbinols upon water desorption. // *Journal of Polymer Research*.– 2015.– Vol.22.– Is.4.– P.58. DOI: 10.1007/s10965-015-0698-2
- I.B. Chernikova, S. L. Khursan, L. V. Spirikhin, M. S. Yunusov. 5-Fluoro-5-halo- and 5-fluoro-5-nitro-substituted uracil derivatives. Synthesis and structure.// *Chem. Heterocycl. Compd.*– 2015.– Vol.51.– Is.6.– P.568-572. DOI: 10.1007/s10593-015-1737-y
- S. O. Bondareva, S. A. Grabovskiy, L. V. Spirikhin, Yu. I. Murinov. Interaction of diacylated ethylenediamine with hydrochloric acid.// *Russ. Chem. Bull.*– 2015.– Vol.64.– Is.2.– P.375-378. DOI: 10.1007/s11172-015-0871-0

ЛАБОРАТОРИЯ КОМПЛЕКСНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ И ЭКСПЕРТНОЙ ОЦЕНКИ ОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

КАК НАС НАЙТИ?



ЧЕМ МЫ ЗАНИМАЕМСЯ?



ОБОРУДОВАНИЕ

ЯМР СПЕКТРОМЕТР AVANCE II 400 МГц



ТЕХНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Предел допускаемой относительной **погрешности** измерений **химического сдвига** сигнала $\pm 0,2 \cdot 10^{-8}\%$.

Предел допускаемой относительной **погрешности** измерений **интенсивности** сигнала $\pm 0,3\%$.

Полуширина сигнала ЯМР эталонного 1% раствора хлороформа в дейтероацетоне с 8 накоплений на уровне 0,55% должно быть **не хуже 6 Гц** и на уровне 0,11% **не хуже 12 Гц**.

Соотношение **сигнал/шум** для CH_2 -группы эталонного образца 0,1% раствора этилбензола в дейтерохлороформе **не хуже 290:1**.

Возможность регистрации спектров на ядрах всех магнито-активных элементов.

Фирма производитель: Bruker, Швейцария

КАКИЕ ВОЗМОЖНОСТИ?



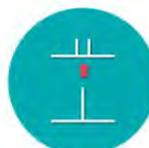
Запись и обработка как одномерных, так и двумерных COSY, NOESY, HMBC или HSQC экспериментов



Установление количественного содержания веществ в смеси



Установление строгой структуры соединения



Наблюдение динамических процессов в растворах

СПЕКТРОМЕТР ЭЛЕКТРОННОГО ПАРАМАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА ELEXSYS E500-10/12



ТЕХНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Спектрометр обладает наилучшими характеристиками среди неимпульсных спектрометров ЭПР и обеспечивает проведение широкого круга экспериментов.

Рабочая частота 9,6 ГГц, $H_{\max} = 1$ Тл,

Чувствительность $5 \cdot 10^{14}$ спин/Тл.

Фирма производитель: Bruker, Германия.

КАКИЕ ВОЗМОЖНОСТИ?



ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ
СВОБОДНЫХ РАДИКАЛОВ В
БИОЛОГИЧЕСКИХ
МАТЕРИАЛАХ



ИССЛЕДОВАНИЕ
ПАРАМАГНЕТИЗМА ТЯЖЕЛЫХ
НЕФТЯНЫХ ОСТАТКОВ



ИССЛЕДОВАНИЕ
СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ В
НАНОМАТЕРИАЛАХ

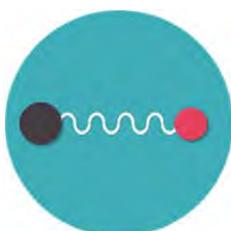


ИЗУЧЕНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКИ
АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ И
КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ
ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

ДРУГОЕ ОБОРУДОВАНИЕ ЛАБОРАТОРИИ



УФ-СПЕКТРОМЕТР, LAMBDA 45. PERKIN ELMER, США, 2003
УФ-СПЕКТРОМЕТР, LAMBDA 35. PERKIN ELMER, США, 2012
УФ СПЕКТРОМЕТР, UV-1800. SHIMADZU, ЯПОНИЯ, 2013
СПЕКТРОФЛУОРИМЕТР F-7000. HITACHI, ЯПОНИЯ, 2014



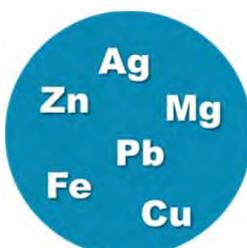
ИК-ФУРЬЕ СПЕКТРОМЕТР, BRUKER, ALPHA. BRUKER OPTICS, ГЕРМАНИЯ, 2009
ИК-ФУРЬЕ СПЕКТРОМЕТР, BRUKER, VERTEX-70. BRUKER OPTICS, ГЕРМАНИЯ, 2010



ГАЗОВЫЙ ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТР GCMS- QP2010 ULTRA EI. SHIMADZU, ЯПОНИЯ, 2013
ГИБРИДНЫЙ КВАДРУПОЛЬНО-ВРЕМЯПРОЛЕТНЫЙ ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТР MICROTOF-Q II. BRUKER, ГЕРМАНИЯ, 2008
МОДУЛЬНЫЙ ЖИДКОСТНЫЙ ХРОМАТОГРАФ, AGILENT 1200 SERIES. AGILENT TECHNOLOGIES, ГЕРМАНИЯ, 2006



С,Н,Н,С АНАЛИЗАТОР PE 2400. PERKIN ELMER, США, 2012



АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ АТОМНО-АБСОРБЦИОННЫЙ СПЕКТРОФОТОМЕТР AA-7000F. SHIMADZU, ЯПОНИЯ, 2010

ШТАТ СОТРУДНИКОВ



ЕЛЬЦОВ ОЛЕГ СТАНИСЛАВОВИЧ

ЗАВЕДУЮЩИЙ ЛАБОРАТОРИЕЙ КОМПЛЕКСНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ И ЭКСПЕРТНОЙ ОЦЕНКИ ОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ЦКП УРФУ, ДОЦЕНТ КАФЕДРЫ ТЕХНОЛОГИИ ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА УРФУ, К.Х.Н.

oleg-eltsov@yandex.ru тел. +79122464404

ОБЛАСТЬ НАУЧНЫХ ИНТЕРЕСОВ:

ЯМР ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ, СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ.



ШТУКИНА ТАИСИЯ СЕМЕНОВНА

НАУЧНЫЙ СОТРУДНИК
ЛАБОРАТОРИИ КОМПЛЕКСНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ И ЭКСПЕРТНОЙ
ОЦЕНКИ ОРГАНИЧЕСКИХ
МАТЕРИАЛОВ ЦКП УРФУ

ОБЛАСТЬ НАУЧНЫХ ИНТЕРЕСОВ:

ЯМР ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ, СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ.



ПАВЛОВА ТАТЬЯНА ДМИТРИЕВНА

НАУЧНЫЙ СОТРУДНИК
ЛАБОРАТОРИИ КОМПЛЕКСНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ И ЭКСПЕРТНОЙ
ОЦЕНКИ ОРГАНИЧЕСКИХ
МАТЕРИАЛОВ ЦКП УРФУ

ОБЛАСТЬ НАУЧНЫХ ИНТЕРЕСОВ:

ЯМР ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ, СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ.



ПЕТРОВ АЛЕКСАНДР СЕРГЕЕВИЧ

АСПИРАНТ, ВЕДУЩИЙ ИНЖЕНЕР
petrov333@bk.ru тел. +79126561305

ОБЛАСТЬ НАУЧНЫХ ИНТЕРЕСОВ:

ИЗУЧЕНИЕ АНТИРАДИКАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ ВЕЩЕСТВ НА МОДЕЛЯХ РАЗЛИЧНЫХ РАДИКАЛОВ МЕТОДОМ ЭПР-СПЕКТРОСКОПИИ

ЦМОКАЛЮК АНТОН НИКОЛАЕВИЧ

ВЕДУЩИЙ ИНЖЕНЕР
atsmok@mail.ru тел. +79222211425

ОБЛАСТЬ НАУЧНЫХ ИНТЕРЕСОВ:

ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИКИ И МЕХАНИЗМОВ РАДИКАЛЬНЫХ РЕАКЦИЙ В ФАРМ. ПРЕПАРАТАХ СОВМЕСТНО ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИМ МЕТОДОМ



1. Synthesis of acyclic nucleoside analogues based on 1,2,4-triazolo[1,5-a]pyrimidin-7-ones by one-step Vorbrüggen glycosylation. *Tetrahedron*, **2014**, vol.70, N 6, p. 298-1306. Igor A. Khalymbadzha, Tatyana S. Shestakova, Julia O. Subbotina, Alexandra A. Musikhina, Vladimir L. Rusinov, Oleg N. Chupakhin, Inna L. Karpenko, Maxim V. Jasko, Marina K. K.ukhanova, Sergey L. Deev.
2. Self-condensation of β -(isoxazol-5-yl) enamines under treatment with acetyl chloride and acids. Synthesis of novel 1,3-diisoxazolyl-1,3-dieneamines and 1,3,5-triisoxazolyl benzenes. *Tetrahedron*, **2014**, Vol. 70, № 25, p. 3915-3923. Tetyana V. Beryozkina, Sergey S. Zhidovinov, Yuri M. Shafran, Eltsov, Pavel A. Slepukhin, Johann Leban, Javier Marquez, Vasilii A. Bakulev.
3. Synthesis, photophysical and electrochemical properties of novel 6,12-di(thiophen-2-yl) substituted indolo[3,2-b]carbazoles. *Tetrahedron*, **2014**, vol.55, №26, p.3603-3606. Roman A. Irgashev, Anton Yu. Teslenko, Ekaterina F. Zhilina, Aleksandr V. Schepochkin, Gennady L. Rusinov, Valery N. Charushin.
4. Reactions of β -Azolylenamines with Sulfonyl Azides as an Approach to N-Unsubstituted 1,2,3-Triazoles and Ethene-1,2-diamines. *European Journal of Organic Chemistry*, **2014**, vol.2014, №17, p.3684-3689. Ilya Efimov, Vasilii Bakulev, Nikolai Beliaev, Tetyana Beryozkina, Uwe Knippschild, Johann Leban, Fan Zhi-Jin, , Pavel Slepukhin, Marina Ezhikova and Wim Dehaen.
5. 3-Naphthoylindazoles and 2-naphthoylbenzoimidazoles as novel ChemiCal groups of synthetiC Cannabinoids: Chemical structure elucidation, analytical characteristics and identification of the first representatives in smoke mixtures. *Forensic Science International*. **2014**, Vol.242, P. 72-80. Vadim Shevyrin, Vladimir Melkozerov, Alexander Nevero, Yuri Morzherin, Yuri Shafran.
6. Synthetic cannabinoids as designer drugs: new representatives of indol-3-carboxylates series and indazole-3-carboxylates as novel group of cannabinoids. Identification and analytical data. *Forensic Science International*. **2014**, vol. 244, p. 263-275. Vadim Shevyrin, Vladimir Melkozerov, Alexander Nevero, Alexander Baranovsky, Yuri Shafran.
7. Synthesis of new 5-aza-isosteres of guanine – 5-aminosubstituted 1,2,4-triazolo[1,5-a]-1,3,5-triazin-7-ones. Synthesis of new 5-aza-isosteres of guanine – 5-aminosubstituted 1,2,4-triazolo[1,5-a]-1,3,5-triazin-7-ones. *Tetrahedron*, **2014**, vol. 70, N 38, p. 6825-6830. Vladimir V. Bakharev, Victor E. Parfenov, Irina V. Ul'yankina, Anna V. Zavodskaya, Evgeniya V. Selezneva, Alexander A. Gidaspov, Pavel A. Slepukhin.
8. Synthesis of isomerically pure 3-(5-trifluoromethyl-1,2,3-triazol-4-yl)cinnamic acid derivatives via the reaction of 4-aryl-6-trifluoromethyl-2-pyrones with sodium azide. *Tetrahedron*, **2014**, vol. 70, N 46, p.8863-8871. Sergey A. Usachev, Boris I. Usachev, Vyacheslav Y. Sosnovskikh.
9. Identification and analytical characteristics of synthetic cannabinoids with an indazole-3-carboxamide structure bearing a N-1-methoxycarbonylalkyl group. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, **2015**, DOI 10.1007/s00216-015-8612-7. Vadim Shevyrin, Vladimir Melkozerov, Alexander Nevero, Yuri Shafran, Yuri Morzherin, Albert T. Lebedev.
10. Reactivity of 1,2,3-triazoles towards sulfonyl chlorides. A novel approach to 1- and 2-sulfonyl-4-azolyl-1,2,3-triazoles. *Tetrahedron*, **2015**, 71 (36), 26924, pp. 6189-6195. Beryozkina, T.V., Efimov, I.V., Fabian, W.M.F., Beliaev, N.A., Slepukhin, P.A., Isenov, M.L., Dehaen, W., Lubec, G., Fan, Z. Thomas, J., Bakulev, V.A.
11. A novel transformation of β -1,2,3-thiadiazol-5-yl enamines into thieno[2,3-d]pyridazines. *Tetrahedron Letters*, **2015**, 56 (12), pp. 1545-1547. Rozin, Y., Zhidovinov, S., Beryozkina, T. Shafran, Y., Lubec, G., Slepukhin, P., Knippschild, U., Bischof, J., Dehaen, W., Bakulev, V.
12. Synthesis of new 5-aza-isosteres of guanine containing aryl and hetaryl substituents on the 1,2,4-triazole ring. *Tetrahedron Letters*, **2015**, 56 (9), pp. 1103-1106. Zavodskaya, A.V., Bakharev, V.V., Parfenov, V.E., Gidaspov, A.A., Slepukhin, P.A., Isenov, M.L.

ФГБУН Институт «Международный томографический центр» СО РАН



www.tomo.nsc.ru

Международный томографический центр (МТЦ) организован в 1989 г. по инициативе академика Р.З. Сагдеева при активной поддержке Президиума СО РАН и Института химической кинетики и горения СО РАН. Большой вклад в создание МТЦ и его становление внесла фирма «Брукер Спектроспин». В 1998 году МТЦ получил свидетельство о государственной аккредитации научной организации и статус бюджетной научно-исследовательской организации при Президиуме СО РАН. С 2000 года организация входит в состав Новосибирского научного центра как Институт «Международный томографический центр» СО РАН.

Сегодня МТЦ СО РАН — это мощный, оснащенный современным оборудованием исследовательский центр. В нем работает 33 научных сотрудников, из которых 1 — академик, 1 — член-корреспондент РАН, 14 — докторов и 17 — кандидатов наук. Значительную часть научных работников, средний возраст которых 37 лет, составляет творческая молодежь.

Ежегодно МТЦ СО РАН публикует около 60 статей и представляет более 100 докладов на Международных и Российских научных конференциях, участвует в выполнении более 35 российских и международных проектов.

МТЦ СО РАН является одним из базовых институтов СО РАН для прохождения дипломной и преддипломной практики студентов физического факультета и факультета естественных наук НГУ. Ученые МТЦ читают лекции и ведут семинарские занятия в Новосибирском государственном университете, кроме того, в МТЦ СО РАН ведется обучение в аспирантуре по специальностям «неорганическая химия», «физическая химия», «органическая химия», «химическая физика, в том числе физика горения и взрыва», «катализ» и «анатомия человека».

ОТДЕЛ МАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

Научный руководитель МТЦ и руководитель отдела академик РАН Сагдеев Ренад Зиннурович



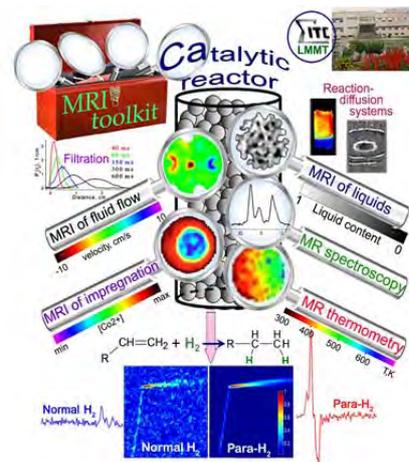
Отдел магнитных явлений

Международного томографического центра СО РАН

Лаборатория магнитно-резонансной микротомографии МТЦ СО РАН

СОСТАВ ЛАБОРАТОРИИ

Игорь Валентинович Коптюг, зав. лаб., д.х.н., профессор
Кирилл Викторович Ковтунов, с.н.с., к.х.н.
Владимир Валерьевич Живонитко, с.н.с., к.х.н.
Иван Владимирович Сковпин, н.с., к.х.н.
Анна Александровна Лысова, н.с., к.х.н.
Олег Георгиевич Сальников, аспирант
Евгений Дмитриевич Петровский, аспирант (ФФ НГУ)
Дударь Баировна Буруева, студент (ФЕН НГУ)
Алексей Сергеевич Романов, студент (ФФ НГУ)
Мария Станиславовна Крестина, студент (ФФ НГУ)



КОНТАКТНАЯ ИНФОРМАЦИЯ ЛАБОРАТОРИИ

Международный томографический центр СО РАН
Ул. Институтская 3А
Новосибирск 630090
Тел.: +7 383 3307926
Факс: +7 383 3331399
koptug@tomo.nsc.ru

Адреса страниц в интернете:

<http://www.tomo.nsc.ru/structure/departments/mrmg/>

<http://www.tomo.nsc.ru/structure/otdel-magnitnykh-yavleniy/laboratoriya-magnitno-rezonansnoy-mikrotomografii/>

Основные направления исследований лаборатории

В последние годы направленность наших исследований значительно изменилась. В результате в текущих работах гораздо меньше представлены исследования процессов массопереноса в пористых материалах, таких как поток и фильтрация жидкостей и газов в каналах и зернистых слоях, сорбция паров и газов в пористых телах, сушка влажных пористых материалов и т.д. Тем не менее, некоторые из этих исследований продолжаются и в настоящее время. Кроме того, разработанные в ходе этих исследований подходы и накопленный опыт обеспечивают прочную основу для решения новых задач. Основное внимание в наших текущих исследованиях уделяется применению ЯМР/МРТ для изучения процессов приготовления и последующего охарактеризования гетерогенных катализаторов, исследованию механизмов каталитических реакций и процессов, которые протекают в гетерогенных катализаторах и модельных каталитических реакторах в условиях протекания реакции, созданию методов усиления сигнала ЯМР/МРТ и получению и изучению свойств долгоживущих спиновых состояний, включая методы на основе использования параводорода, и ряду других проблем. Одним из недавно добавившихся направлений являются биомедицинские применения ЯМР томографии и спектроскопии.

В настоящее время научно-исследовательская деятельность лаборатории включает такие направления, как:

1. ЯМР (микро)томография и спектроскопия катализаторов, каталитических реакций и реакторов:

- ЯМР (микро)томография и пространственно-разрешенная ЯМР спектроскопия жидкостей и газов в пористых средах, и в частности их приложения к изучению каталитических и других химических процессов (например, исследования каталитических реакций в пористых катализаторах и модельных каталитических реакторах *in situ*)
- ЯМР (микро)томография распределения и транспорта предшественников активных компонентов и других растворенных веществ при приготовлении нанесенных катализаторов (например, путем пропитки/сушки пористых гранул носителя)

2. Усиление сигнала в ЯМР/МРТ с использованием индуцированной параводородом поляризации ядерных спинов (ИППЯ):

- Разработка эффективных гетерогенных катализаторов (например, иммобилизованных комплексов металлов, нанесенных металлов и других типов), способных обеспечить предельные коэффициенты усиления сигнала ЯМР.
- Распространение методов на основе ИППЯ на реакции, отличные от гидрирования непредельных углеводородов.
- Комбинирование ИППЯ с уникальными свойствами долгоживущих спиновых состояний.
- Создание ИППЯ технологий для получения непрерывных потоков чистых гиперполяризованных жидкостей и газов и их использования для приложений МРТ, в том числе для биомедицинской МРТ и в комбинации со свойствами долгоживущих спиновых состояний.
- Создание и развитие на основе ИППЯ сверхчувствительных методов исследования механизмов гетерогенных каталитических процессов и процессов в функционирующих каталитических реакторах.
- Исследования ядерных спиновых изомеров симметричных молекул.

3. Биологические приложения ЯМР и МРТ:

- Разработка и применение новых стратегий для многоядерной томографии и спектроскопии ЯМР *in vivo* с высоким отношением сигнал/шум и контраст/шум
- Создание и применение новых тераностических агентов для ЯМР/МРТ *in vivo*
- ЯМР метаболомика в норме и патологии

Наши исследования в настоящее время проводятся при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ) и Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ). Базовое бюджетное финансирование осуществляется ФАНО.

1) Магнитно-резонансная спектроскопия и микротомография

Исследования с помощью метода ЯМР микротомографии позволяют получить информацию о пространственном распределении жидкостей и газов в любом сечении исследуемого образца неразрушающим образом, с пространственным разрешением порядка сотен или даже десятков микрон. Метод может быть использован для изучения динамических процессов *in situ* в режиме реального времени без прерывания изучаемого процесса. Одно из преимуществ МРТ по сравнению с другими томографическими методами состоит в том, что МРТ может предоставлять пространственные карты не только количества вещества, но и широкого спектра других свойств изучаемых объектов и протекающих в них процессов. Кроме того, ЯМР является спектроскопическим методом, поэтому объединение ЯМР и МРТ/МРМ обеспечивает доступ к пространственно-разрешенной информации о химическом составе (например, отдельные карты пространственного распределения реагента и продукта в функционирующем реакторе).

Эксперименты проводятся с использованием двух ЯМР систем фирмы Bruker: **спектрометра ЯМР Avance III 400 с приставкой для микротомографии (градиент магнитного поля до 150 Гс/см или 1,5 Тл/м) и ЯМР-спектрометра AV 300 SB.**

2) Усиление сигнала в ЯМР/МРТ и индуцированная параводородом поляризация ядер

Многие приложения ЯМР/МРТ страдают от (или даже невозможны из-за) относительно низкой чувствительности метода, вызванной слабым взаимодействием ядерных спинов с внешними магнитными полями и, следовательно, их слабой ориентацией по отношению к постоянному магнитному полю. Семейство так называемых методов гиперполяризации ядерных спинов позволяет заставить ядерные спины преимущественно ориентироваться в одном направлении в гораздо большей степени по сравнению с тепловым равновесием даже в сверхсильных магнитных полях современных приборов для ЯМР/МРТ. Гиперполяризация спинов ядер в диамагнитных молекулах и материалах является одной из горячих областей современного магнитного резонанса, поскольку может обеспечить усиление сигнала ЯМР примерно на 4 порядка величины в сильных магнитных полях современных магнитов, применяемых в ЯМР/МРТ. В слабых магнитных полях, где вопрос чувствительности стоит особенно остро, усиление сигналов ЯМР за счет гиперполяризации может быть значительно больше. Индуцированная параводородом поляризация ядер (ИППЯ) входит в семейство методов гиперполяризации спинов. Метод ИППЯ основан на использовании ядерных спиновых изомеров молекулярного водорода H_2 (параводорода с полным ядерным спином двух атомов водорода $I = 0$, или в некоторых случаях ортоводорода с $I = 1$) в каталитической реакции гидрирования соответствующего субстрата. В результате реакции симметрия молекулы H_2 , как правило, нарушается, и исходная корреляция ядерных спинов молекулы пара- H_2 превращается в значительное усиление сигналов ЯМР продукта реакции. Поляризация двух атомов водорода, которые первоначально пришли в продукт из молекулы H_2 , может быть перенесена на другие атомы (водорода или других ядер с ненулевым ядерным спином, таких как ^{13}C , ^{19}F и т.д.) в молекуле продукта, что значительно расширяет сферу многих возможных приложений ИППЯ в спектроскопии и томографии на основе ЯМР. Примеры таких приложений включают гиперчувствительные исследования механизмов гомогенных и гетерогенных каталитических реакций, изучение *in vivo* метаболизма лабораторных животных и др.

В лаборатории имеется простой **конвертер параводорода** для получения смесей H_2 , **обогащенных параводородом** (соотношение пара- H_2 :орто- $H_2 = 1:1$). В 2013 году был запущен **генератор параводорода фирмы Bruker** (BPHG 90, пара- H_2 :орто- $H_2 > 9:1$). Создана **установка для проведения гетерогенных каталитических процессов гидрогенизации ненасыщенных субстратов** либо в магнитном поле земли (эксперимент ALTADENA), либо в сильном магнитном поле спектрометра ЯМР (эксперимент PASADENA).

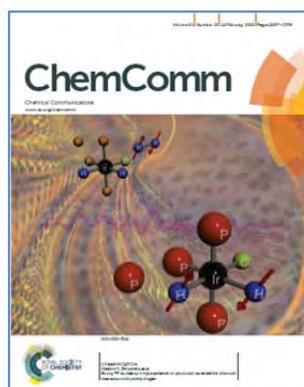
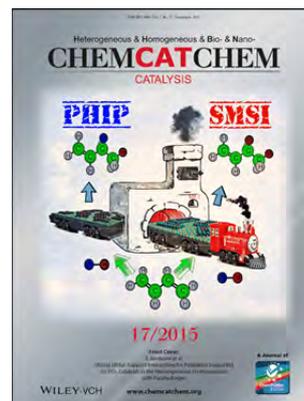
3) ЯМР томография и спектроскопия in vivo и in vitro

Исследования лабораторных животных методом МРТ in vivo выполняются в рамках Межинститутского научно-исследовательского сектора томографии лабораторных животных МТЦ СО РАН и ИЦиГ СО РАН (руководитель - д.х.н., проф. И.В. Коптюг).

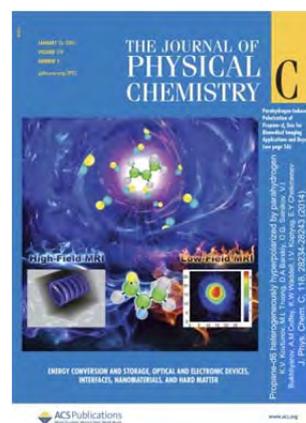
Исследования выполняются на **сверхвысокопольном томографе «BioSpec 117/16» (Bruker) с магнитным полем 11,7 Тл (частота ЯМР 1H 500 МГц)**. Прибор установлен в здании SPF-вивария ИЦиГ СО РАН в ноябре 2009 г. Исследования метаболомного состава экстрактов тканей и биожидкостей выполняются in vitro на **спектрометре ЯМР Avance III HD 700**.

Публикации лаборатории (2014-2015)

1. D.A. Barskiy, A.N. Pravdivtsev, K.L. Ivanov, K.V. Kovtunov, I.V. Koptuyug. Simple analytical model for signal amplification by reversible exchange (SABRE) process, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **18**, 89-93 (2016); doi: 10.1039/C5CP05134G
2. K.V. Kovtunov, D.A. Barskiy, O.G. Salnikov, D.B. Burueva, A.K. Khudorozhkov, A.V. Bukhtiyarov, I.P. Prosvirin, E.Y. Gerasimov, V.I. Bukhtiyarov, I.V. Koptuyug. Strong metal-support interactions for palladium supported on TiO₂ catalysts in the heterogeneous hydrogenation with parahydrogen, *ChemCatChem*, **7**, 2581-2584 (2015); doi: 10.1002/cctc.201500618
3. М.С. Крестина, О.Б. Шевелев, И.В. Коптюг, Л.А. Герлинская, С.Е. Пельтек, А.Е. Акулов. Возможности высокотехнологичного фенотипирования методом спектроскопии ЯМР на примере метаболического отклика печени крыс на воздействие алкоголя, *Вавиловский Ж. Генет. Селект.*, **19**, 387-392 (2015); doi: 10.18699/VJ15.067
4. O.G. Salnikov, D.B. Burueva, D.A. Barskiy, G.A. Bukhtiyarova, K.V. Kovtunov, I.V. Koptuyug. A mechanistic study of thiophene hydrodesulfurization by the parahydrogen-induced polarization technique, *ChemCatChem*, **7**, 3508-3512 (2015); doi: 10.1002/cctc.201500691
5. O.G. Salnikov, K.V. Kovtunov, I.V. Koptuyug. Production of catalyst-free hyperpolarised ethanol aqueous solution via heterogeneous hydrogenation with parahydrogen, *Sci. Rep.*, **5**, 13930 (2015); doi: 10.1038/srep13930
6. A. Corma, O.G. Salnikov, D.A. Barskiy, K.V. Kovtunov, I.V. Koptuyug. Single-atom gold catalysis in the context of developments in parahydrogen-induced polarization, *Chem. Eur. J.*, **21**, 7012-7015 (2015); doi: 10.1002/chem.201406664
7. A.S. Chubarov, O.D. Zakharova, O.A. Koval, A.V. Romaschenko, A.E. Akulov, E.L. Zavjalov, I.A. Razumov, I.V. Koptuyug, D.G. Knorre, T.S. Godovikova. Design of protein homocystamides with enhanced tumor uptake properties for ¹⁹F magnetic resonance imaging, *Bioorg. Med. Chem.*, **23**, 6943-6954 (2015); doi: 10.1016/j.bmc.2015.09.043
8. S. Ahola, V.V. Zhivonitko, O. Mankinen, G. Zhang, A.M. Kantola, H.-Y. Chen, C. Hilty, I.V. Koptuyug, V.-V. Telkki. Ultrafast multidimensional Laplace NMR for a rapid and sensitive chemical analysis, *Nature Comm.*, **6**, 8363 (2015); doi: 10.1038/ncomms9363
9. D.A. Barskiy, O.G. Salnikov, K.V. Kovtunov, I.V. Koptuyug. NMR signal enhancement for hyperpolarized fluids continuously generated in hydrogenation reactions with parahydrogen, *J. Phys. Chem. A*, **119**, 996-1006 (2015); doi: 10.1021/jp510572d
10. M.P. Moshkin, A.E. Akulov, D.V. Petrovski, O.V. Saik, E.D. Petrovskiy, A.A. Savelov, I.V. Koptuyug. Proton magnetic resonance spectroscopy of brain metabolic shifts induced by acute administration of 2-deoxy-d-glucose and lipopolysaccharides, *NMR Biomed.*, **27**, 399-405 (2014); doi: 10.1002/nbm.3074
11. M.P. Moshkin, D.V. Petrovski, A.E. Akulov, A.V. Romashchenko, L.A. Gerlinskaya, V.L. Ganimedov, M.I. Muchnaya, A.S. Sadovskiy, I.V. Koptuyug, A.A. Savelov, S.Y. Troitskiy, Y.M. Moshkn, V.I. Bukhtiyarov, N.A. Kolchanov, R.Z. Sagdeev, V.M. Fomin. Nasal aerodynamics protects brain and lung from inhaled dust in subterranean diggers, *Ellobius talpinus*, *Proc. R. Soc. B*, **281**, 20140919 (2014); doi: 10.1098/rspb.2014.0919
12. V.V. Zhivonitko, I.V. Skovpin, I.V. Koptuyug. Strong ³¹P nuclear spin hyperpolarization produced via reversible chemical interaction with parahydrogen, *Chem. Commun.*, **51**, 2506-2509 (2015); doi: 10.1039/C4CC08115C
13. K.V. Kovtunov, M.L. Truong, D.A. Barskiy, I.V. Koptuyug, A.M. Coffey, K.W. Waddell, E.Y. Chekmenev. Long-lived spin states for low-field hyperpolarized gas MRI, *Chem. Eur. J.*, **20**, 14629-14632 (2014); doi: 10.1002/chem.201405063
14. V.-V. Telkki, V.V. Zhivonitko, A. Selent, G. Scotti, J. Leppaniemi, S. Franssila, I.V. Koptuyug. Lab-on-a-chip reactor imaging with unprecedented chemical resolution by Hadamard-encoded remote detection NMR, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **53**, 11289-11293 (2014); doi: 10.1002/anie.201405681
15. I.V. Koptuyug. "Magnetic resonance imaging methods in heterogeneous catalysis", in: *Spectroscopic Properties of Inorganic and Organometallic Compounds*, R. Douthwaite, S. Duckett, J. Yarwood, eds. 2014, Royal Society of Chemistry: Cambridge, 1-42
16. А.Е. Акулов, Т.А. Алехина, И.О. Мешков, Е.Д. Петровский, О.И. Прокудина, И.В. Коптюг, А.А. Савелов, М.П. Мошкин. Отбор на кататонический тип реагирования у крыс: исследование межлинейных различий методом магнитно-резонансной томографии, *Ж. высш. нервн. деят. им. Павлова*, **64**, 439-447 (2014).
17. D.A. Barskiy, K.V. Kovtunov, I.V. Koptuyug, P. He, K.A. Groome, Q.A. Best, F. Shi, B.M. Goodson, R.V. Shchepin, A.M. Coffey, K.W. Waddell, E.Y. Chekmenev. The feasibility of formation and kinetics of NMR signal amplification by reversible exchange (SABRE) at high magnetic field (9.4 T), *J. Am. Chem. Soc.*, **136**, 3322-3325 (2014); doi: 10.1021/ja501052p



18. K.V. Kovtunov, D.A. Barskiy, A.M. Coffey, M.L. Truong, O.G. Salnikov, A.K. Khudorozhkov, E.A. Inozemtseva, I.P. Prosvirin, V.I. Bukhtiyarov, K.W. Waddell, E.Y. Chekmenev, I.V. Koptiug. High-resolution 3D proton MRI of hyperpolarized gas enabled by parahydrogen and Rh/TiO₂ heterogeneous catalyst, *Chem. Eur. J.*, **20**, 11636-11639 (2014); doi: 10.1002/chem.201403604
19. K.V. Kovtunov, D.A. Barskiy, R.V. Shchepin, A.M. Coffey, K.W. Waddell, I.V. Koptiug, E.Y. Chekmenev. Demonstration of heterogeneous parahydrogen induced polarization using hyperpolarized agent migration from dissolved Rh(I) complex to gas phase, *Anal. Chem.*, **86**, 6192-6196 (2014); doi: 10.1021/ac5013859
20. D.A. Barskiy, K.V. Kovtunov, I.V. Koptiug, P. He, K.A. Groome, Q.A. Best, F. Shi, B.M. Goodson, R.V. Shchepin, M.L. Truong, A.M. Coffey, K.W. Waddell, E.Y. Chekmenev. In situ and ex situ low-field NMR spectroscopy and MRI endowed by SABRE hyperpolarization, *ChemPhysChem*, **15**, 4100-4107 (2014); doi: 10.1002/cphc.201402607
21. K.V. Kovtunov, D.A. Barskiy, O.G. Salnikov, A.K. Khudorozhkov, V.I. Bukhtiyarov, I.P. Prosvirin, I.V. Koptiug. Parahydrogen-induced polarization (PHIP) in heterogeneous hydrogenations over bulk metals and metal oxides, *Chem. Commun.*, **50**, 875-878 (2014); doi: 10.1039/C3CC44939D
22. O.G. Salnikov, K.V. Kovtunov, D.A. Barskiy, A.K. Khudorozhkov, E.A. Inozemtseva, I.P. Prosvirin, V.I. Bukhtiyarov, I.V. Koptiug. Evaluation of the mechanism of heterogeneous hydrogenation of alpha,beta-unsaturated carbonyl compounds via pairwise hydrogen addition, *ACS Catal.*, **4**, 2022-2028 (2014); doi: 10.1021/cs500426a
23. K.V. Kovtunov, M.L. Truong, D.A. Barskiy, O.G. Salnikov, V.I. Bukhtiyarov, A.M. Coffey, K.W. Waddell, I.V. Koptiug, E.Y. Chekmenev. Propane-d₆ heterogeneously hyperpolarized by parahydrogen, *J. Phys. Chem. C*, **118**, 28234-28243 (2014); doi: 10.1021/jp508719n
24. V.V. Zhivonitko, V.-V. Telkki, K. Chernichenko, T.J. Repo, M. Leskela, V. Sumerin, I.V. Koptiug. Tweezers for parahydrogen: a metal-free probe of non-equilibrium nuclear spin states of H₂ molecules, *J. Am. Chem. Soc.*, **136**, 598-601 (2014); doi: 10.1021/ja410396g
25. A.M. Coffey, K.V. Kovtunov, D.A. Barskiy, I.V. Koptiug, R.V. Shchepin, K.W. Waddell, P. He, K.A. Groome, Q.A. Best, F. Shi, B.M. Goodson, E.Y. Chekmenev. High-resolution low-field molecular magnetic resonance imaging of hyperpolarized liquids, *Anal. Chem.*, **86**, 9042-9049 (2014); doi: 10.1021/ac501638p
26. M.L. Truong, F. Shi, P. He, B. Yuan, K.N. Plunkett, A.M. Coffey, R.V. Shchepin, D.A. Barskiy, K.V. Kovtunov, I.V. Koptiug, K.W. Waddell, B.M. Goodson, E.Y. Chekmenev. Irreversible catalyst activation enables hyperpolarization and water solubility for NMR signal amplification by reversible exchange, *J. Phys. Chem. B*, **118**, 13882-13889 (2014); doi: 10.1021/jp510825b
27. В.П. Анаников, Л.Л. Хемчян, Ю.В. Иванова, В.И. Бухтияров, А.М. Сорокин, И.П. Просвирин, С.З. Вацадзе, А.В. Медведько, В.Н. Нуриев, А.Д. Дильман, В.В. Левин, И.В. Коптюг, К.В. Ковтунов, В.В. Живонитко, В.А. Лихолобов, В.С. Кузьмин, П.А. Симонов, В.Г. Ненайденко, О.И. Шматова, В.М. Музалевский, М.С. Нечаев, А.Ф. Асаченко, О.С. Морозов, П.Б. Джеваков, С.Н. Осипов, Д.В. Воробьева, М.А. Топчий, М.А. Зотова, С.А. Пономаренко, О.В. Борщев, Ю.Н. Лупоносов, А.А. Ремпель, А.А. Валеева, А.Ю. Стахеев, О.В. Турова, И.С. Машковский, С.В. Сысолятин, В.В. Малыхин, Г.А. Бухтиярова, А.О. Терентьев, И.Б. Крылов. Развитие методологии современного селективного органического синтеза: получение функционализированных молекул с атомарной точностью (atomistic precision), *Успехи химии*, **83**, 885-985 (2014); doi: 10.1070/RC2014v083n10ABEH004471
28. O.G. Salnikov, D.A. Barskiy, D.B. Burueva, Y.K. Gulyaeva, B.S. Balzhinimaev, K.V. Kovtunov, I.V. Koptiug. Evaluation of activation energies for pairwise and non-pairwise hydrogen addition to propyne over Pd/aluminosilicate fiberglass catalyst by parahydrogen-induced polarization (PHIP), *Appl. Magn. Reson.*, **45**, 1051-1061 (2014); doi: 10.1007/s00723-014-0586-7
29. М.П. Мошкин, Д.В. Петровский, А.Е. Акулов, А.В. Ромащенко, Л.А. Герлинская, М.И. Мучная, В.Л. Ганимедов, А.С. Садовский, А.А. Савелов, И.В. Коптюг, С.Ю. Троицкий, В.И. Бухтияров, Н.А. Колчанов, Р.З. Сагдеев, В.М. Фомин. Осаждение аэрозолей в носовых ходах норных и наземных грызунов при дыхании в запыленной среде, *Ж. общ. биол.*, **75**, 214-225 (2014).
30. V.V. Zhivonitko, K.V. Kovtunov, I.V. Skovpin, D.A. Barskiy, O.G. Salnikov, I.V. Koptiug. "Catalytically enhanced NMR of heterogeneously catalyzed hydrogenations, Computational and experimental tools", in: Understanding organometallic reaction mechanisms and catalysis, V.P. Ananikov, eds. 2014, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 145-186



Группы

фотохимических радикальных реакций

и спиновой динамики

Сотрудники

Юрковская Александра Вадимовна

Руководитель группы Фотохимических радикальных реакций, ведущий научный сотрудник, доктор физико-математических наук

Телефон +7 (383) 333-13-33; yurk@tomo.nsc.ru



Ханс-Мартин Фит

Руководитель проекта РФФ «Фото-индуцированная спиновая гиперполяризация в конденсированных средах», ведущий научный сотрудник, профессор

Телефон +7 (383) 333-13-33; hmvieth@zedat.fu-berlin.de



Иванов Константин Львович

Руководитель группы Спиновой динамики, доктор физико-математических наук, профессор РАН

Телефон +7 (383) 330-88-68; ivanov@tomo.nsc.ru



Морозова Ольга Борисовна

Старший научный сотрудник, кандидат химических наук

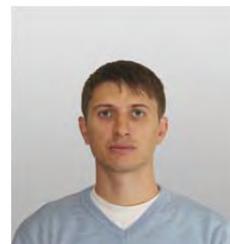
Телефон +7 (383) 333-13-33; om@tomo.nsc.ru



Кирютин Алексей Сергеевич

Научный сотрудник, кандидат химических наук

Телефон +7 (383) 330-39-59; kalex@tomo.nsc.ru



Правдивцев Андрей Николаевич

Младший научный сотрудник, кандидат физико-математических наук

Телефон +7 (383) 333-13-33; a.n.true@tomo.nsc.ru



Фишман Наталья Николаевна

Младший научный сотрудник

Телефон +7 (383) 333-13-33; n_s@tomo.nsc.ru



Насибулов Егор Андреевич

Аспирант

Телефон +7 (383) 330-88-68; nasibulov@tomo.nsc.ru



Панов Михаил Сергеевич

Аспирант

Телефон +7 (383) 333-13-33; mike.p@tomo.nsc.ru



Сосновский Денис Викторович

Аспирант

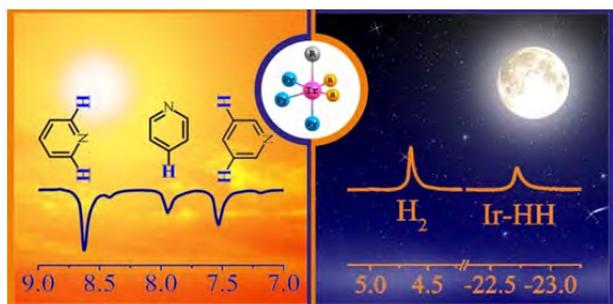
Телефон +7 (383) 330-88-68; denis.sosnovsky@tomo.nsc.ru



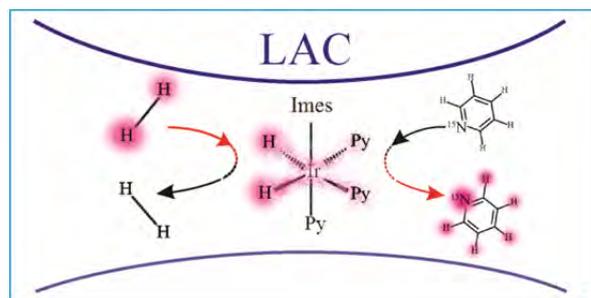
ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ

1. Исследование кинетики и механизма реакции переноса электрона между радикалами нуклеотидов и ароматическими аминокислотами, моделирующих процесс химической репарации ДНК.
2. Исследование структуры и реакционной способности радикальных интермедиатов в фотохимических реакциях с участием аминокислот, азотистых оснований нуклеиновых кислот, пептидов и олигонуклеотидов.
3. Разработка фундаментальных основ и формирование современной концептуальной базы для количественного применения метода «меток ХПЯ» к исследованию структуры, реакционной способности и динамических свойств и процессов в биологических макромолекулах - белках и нуклеиновых кислотах.
4. Изучение кинетики и механизма реакций, а также кинетики и механизма формирования ядерной поляризации и полевых зависимостей ХПЯ в фотохимических реакциях в водных растворах с участием структурных единиц биомолекул (аминокислот, пептидов, нуклеотидов и олигонуклеотидов).
5. Экспериментальное и теоретическое исследование формирования и переноса индуцированной параводородом ядерной поляризации в различных магнитных полях на примере органических молекул в растворах.
6. Развитие теории спиновой гиперполяризации (ХПЯ, ДПЯ, ИППЯ).
7. Разработка новых методов переноса спиновой поляризации в ЯМР в анти-пересечениях спиновых уровней энергии.
8. Исследование зависимости эффектов спиновой релаксации от напряженности магнитного поля.
9. Применение долгоживущего спинового порядка в ЯМР и МРТ.

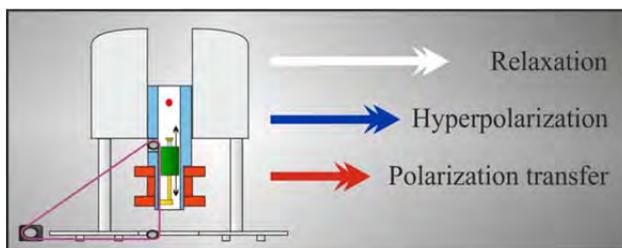
ОСНОВНЫЕ ДОСТИЖЕНИЯ



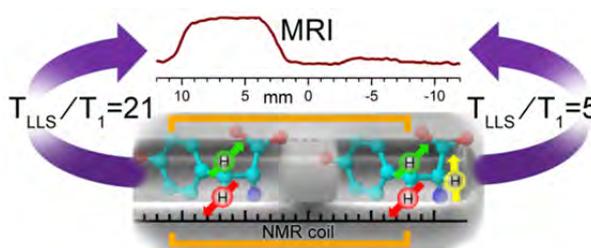
Установлены основные закономерности образования эффекта SABRE, в котором гиперполяризация молекул-субстратов формируется за счет переноса спинового порядка с параводорода в промежуточном комплексе



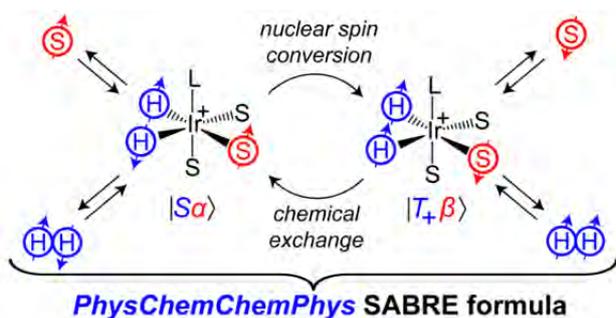
Показано, что возможен эффективный перенос поляризации SABRE на протоны и гетероядра при выполнении условий для анти-пересечений спиновых уровней энергии



Создана установка ЯМР высокого разрешения с быстрым переключением внешнего магнитного поля, позволяющая проводить эксперименты по исследованию спиновой релаксации и спиновой гиперполяризации в широком диапазоне полей

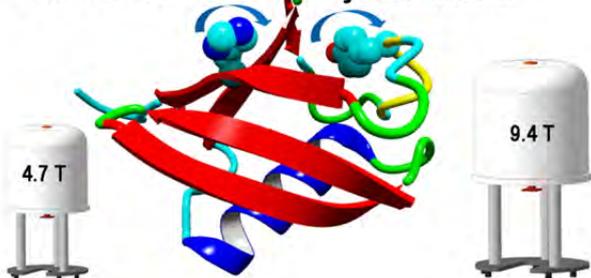


Предложены экспериментальные протоколы для получения контраста МРТ изображений за счет долгоживущих спиновых состояний



Разработана количественная теория SABRE, учитывающая спиновую динамику в комплексе SABRE и химическую кинетику его формирования

His68: 0.11 нс Tyr59: 1.3 нс



Разработан чувствительный неразрушающий метод для определения параметров внутримолекулярной подвижности белков на наносекундной шкале с атомным разрешением

- Обнаружены новые когерентные эффекты в поведении гиперполяризованных спиновых систем: показано, что диамагнитные продукты химических реакций могут образовываться в неравновесном когерентном ядерном спиновом состоянии.
- Развита общая теория индуцируемой параводородом поляризации ядер (ИППЯ): установлены правила для знака ИППЯ и впервые рассчитана зависимость ИППЯ от величины внешнего магнитного поля; расчеты показывают хорошее согласие с экспериментальными данными.
- Получены новые результаты по релаксации многоспиновых систем: показано, что наличие спин-спиновых взаимодействий кардинальным образом меняет характер спиновой релаксации в слабых магнитных полях, где взаимодействующие спины стремятся релаксировать с одинаковой скоростью.
- Для скорости релаксации и для эффективности переноса гиперполяризации обнаружены особенности в зависимости от величины внешнего магнитного поля, обусловленные анти-пересечениями спиновых уровней энергии. Установлена определяющая роль анти-пересечений уровней при переносе поляризации в слабых магнитных полях.
- Разработаны новые методы создания так называемых долгоживущих спиновых состояний, позволяющих сохранять гиперполяризацию в течение долгого времени. Предложены экспериментальные протоколы для получения контраста МРТ изображений за счет долгоживущих спиновых состояний.
- Установлены основные закономерности образования эффекта SABRE – варианта метода ИППЯ, в котором гиперполяризация молекул-субстратов формируется за счет переноса спинового порядка с параводорода в промежуточном комплексе. Разработан оригинальный подход для проведения экспериментов по SABRE непосредственно в сильном магнитном поле спектрометра ядерного магнитного резонанса, обеспечивающий непрерывную генерацию спиновой гиперполяризации.
- Развита теория ДПЯ в жидкости при импульсной ЭПР накачке.
- Разработана количественная теория SABRE, учитывающая спиновую динамику в комплексе SABRE и химическую кинетику его формирования.
- Создана установка ЯМР высокого разрешения с быстрым переключением внешнего магнитного поля в диапазоне магнитных полей от 0.1 мТл до 7 Тл. Методом переключения поля является быстрое позиционирование ЯМР датчика с образцом во внешнем магнитном поле. Время переключения составляет менее 0.3 сек; данная установка позволяет проводить эксперименты по исследованию спиновой релаксации и спиновой гиперполяризации (ХПЯ, ИППЯ, ДПЯ, ОПЯ) в указанном диапазоне полей.
- Разработан чувствительный неразрушающий метод для определения параметров внутримолекулярной подвижности белков на наносекундной шкале с атомным разрешением. Метод основан на использовании зависимости от напряженности магнитного поля времен парамагнитной релаксации протонов, измеренных по сигналам ХПЯ, создаваемой при обратимом фотоокислении белка в присутствии фотосенсибилизатора.
- Разработан метод измерения констант СТВ в короткоживущих радикалах при помощи ХПЯ, использующий установленное нами соотношение пропорциональности между константами СТВ ядер в радикалах и интенсивностью их сигналов ХПЯ в диамагнитных продуктах реакции.
- Для обратимой реакции внутримолекулярного переноса электрона в короткоживущих окисленных пептидах импульсным методом химической поляризации ядер было впервые выявлено сильное дестабилизирующее влияние положительного заряда аминокислотной группы на катион-радикал триптофана для ряда пептидов, содержащих триптофан, тирозин и глицин. Оно по-разному проявляется в модуляции констант скорости прямой и обратной реакций, а именно: константа скорости прямой реакции переноса электрона с остатка тирозина на радикал триптофана возрастает на два порядка при наличии заряженной аминокислотной группы вблизи остатка триптофана, но константа скорости обратной реакции от структуры пептида зависит слабо. Данные важны для описания переноса электрона в функциональных состояниях белковых молекул.

ОБОРУДОВАНИЕ

Оборудование для ЯМР спектроскопии и фотоиндуцированной гиперполяризации

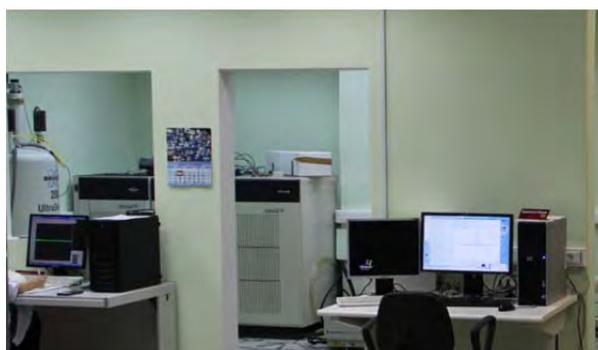
1. ЯМР спектрометр Avance 300. Используется для исследований процессов методом индуцированной параводородом поляризации ядер (ИППЯ).
2. ЯМР спектрометр Avance 200. Используется для проведения экспериментов ХПЯ с микросекундным временным разрешением.
3. ЯМР спектрометр Avance III HD 700. Используется для ЯМР исследований белков и нуклеиновых кислот.
4. ЯМР спектрометр Avance III HD 400. Используется для ЯМР времяразрешенных экспериментов ХПЯ на протонах и на гетероядрах, фотоиндуцированных ядерной гиперполяризации индуцированной параводородом, исследований белков и нуклеиновых кислот.
5. Установка ЯМР высокого разрешения с быстрым (0.3 сек.) переключением магнитного поля от 0.1 мТл до 7 Тл для исследования фотоиндуцированной и индуцированной параводородом ядерной гиперполяризации и дисперсии ядерной релаксации.

Фотохимическое оборудование

1. Спектрофотометр Agilent 8453. Используется измерения УФ спектров растворов.
2. Эксимерные лазеры COMPEXPro и Lambda Physics (длина волны 308 нм) и два твердотельных Nd:YAG лазера с генерацией на 2,3,4 гармониках. Используются для исследования гиперполяризации в фотоиндуцированных процессах генерирования радикалов в датчике спектрометров 200, 300, 400 и 700 Мгц.
3. Лиофильная сушка Alpha 1-2 LDplus. Используется для приготовления белковых образцов для ЯМР исследований.

Прочее оборудование

1. Комплекс стандартного физического и химического лабораторного оборудования (весы, рН-метры и проч.).
2. Компьютерная техника и пакеты программ, позволяющие проводить обработку и анализ полученных данных и изображений.



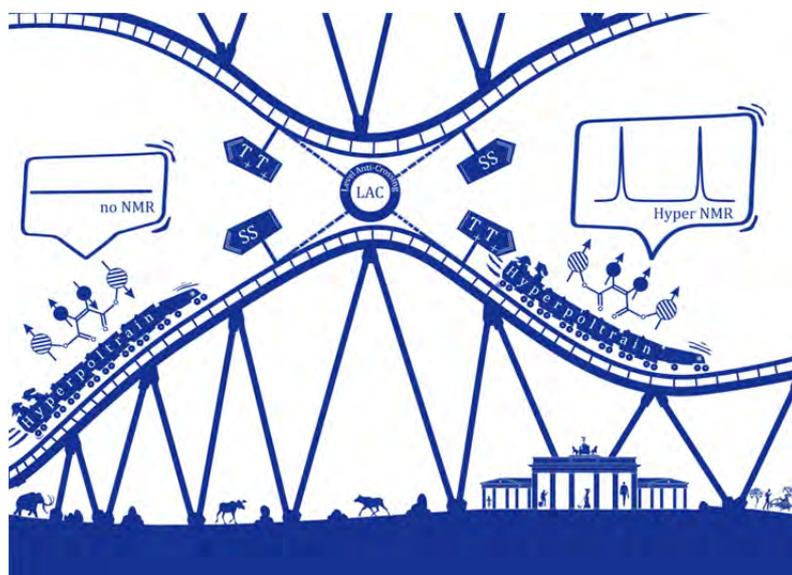
ПУБЛИКАЦИИ (2014-2016)

2016 год

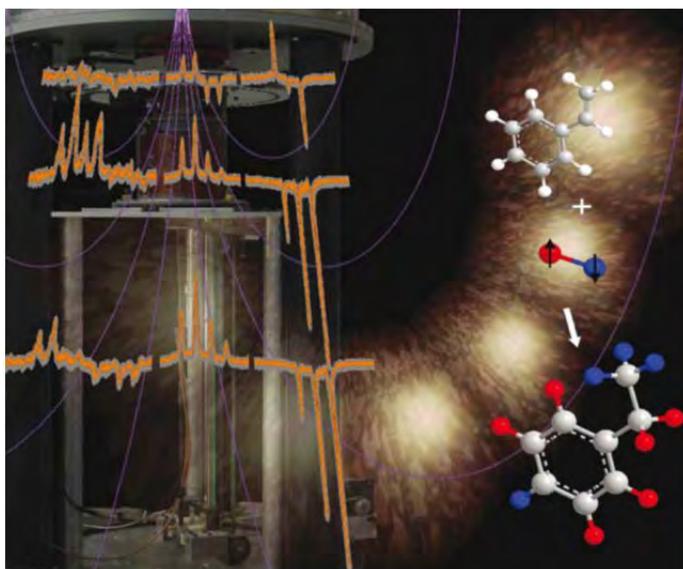
1. D. A. Barskiy, A. N. Pravdivtsev, K. L. Ivanov, K. V. Kovtunov, I. V. Koptyug. «Simple analytical model for Signal Amplification by Reversible Exchange (SABRE) process», *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **18**, 89-93 (2016) DOI: 10.1039/C5CP05134G.
2. A. S. Kiryutin, A. N. Pravdivtsev, K. L. Ivanov, Yu. A. Grishin, H.-M. Vieth, A. V. Yurkovskaya. «A fast field-cycling device for high-resolution NMR: design and application to spin relaxation and hyperpolarization experiments», *J. Magn. Reson.*, **263**, 79-91 (2016) DOI: 10.1016/j.jmr.2015.11.017.
3. S. Knecht, A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, J.-B. Hövener, K. L. Ivanov. «Quantitative description of the SABRE process: rigorous consideration of spin dynamics and chemical exchange», *RSC Advances.*, **6**, 24470-24477 (2016) DOI: 10.1039/C5RA28059A.
4. A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, P. A. Petrov, H.-M. Vieth, K. L. Ivanov. «Analysis of the SABRE (Signal Amplification By Reversible Exchange) effect at high magnetic fields», *Appl. Magn. Reson.*, (2016) DOI: 10.1007/s00723-016-0771-y.
5. O. B. Morozova, M. S. Panov, H.-M. Vieth, A. V. Yurkovskaya. «CIDNP study of sensitized photooxidation of S-methylcysteine and S-methylglutathione in aqueous solution», *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry* **321**, 90-98 (2016) DOI: 10.1016/j.jphotochem.2016.01.013.

2015 год

6. O. B. Morozova, A. V. Yurkovskaya. «Assessment of Nanosecond Time Scale Motions in Native and Non-Native States of Ubiquitin», *J. Phys. Chem. B*, **119**, 12644-12652 (2015) DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b07333.
7. O. B. Morozova, A. V. Yurkovskaya. «Modulation of the Rate of Reversible Electron Transfer in Oxidized Tryptophan and Tyrosine Containing Peptides in Acidic Aqueous Solution», *J. Phys. Chem. B*, **119**, 140-149 (2015) DOI: 10.1021/Jp511068n.
8. A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, K. L. Ivanov, H.-M. Vieth. «Importance of polarization transfer in reaction products for interpreting and analyzing CIDNP at low magnetic fields», *J. Magn. Reson.*, **254**, 35-47 (2015) DOI: 10.1016/j.jmr.2015.02.008.
9. D. Mance, P. Gast, M. Huber, M. Baldus, K. L. Ivanov. «The magnetic field dependence of cross-effect dynamic nuclear polarization under Magic Angle Spinning», *J. Chem. Phys.*, **142**, 234201 (2015) DOI: 10.1063/1.4922219.
10. A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, H.-M. Vieth, K. L. Ivanov. «RF-SABRE: a way to continuous spin hyperpolarization at high magnetic fields», *J. Phys Chem. B* **119**, 13619-13629 (2015) DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b03032.
11. A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, H. Zimmermann, H.-M. Vieth, K. L. Ivanov. «Transfer of SABRE-derived hyperpolarization to spin $\frac{1}{2}$ heteronuclei», *RSC Adv.*, **5**, 63615-63623 (2015) DOI: 10.1039/C5RA13808F.
12. K. L. Ivanov, V. M. Sadovsky, N. N. Lukzen. «Theoretical description of spin-selective reactions of radical pairs diffusing in spherical 2D and 3D microreactors», *J. Chem. Phys.*, **143**, 084110 (2015) DOI: 10.1063/1.4928648.
13. A. N. Правдивцев, К. Л. Иванов, А. В. Юрковская, Х.-М. Фит, Р. З. Сагдеев. «Спонтанный перенос индуцируемой параводородом поляризации ядер на спины ^{13}C в симметричных молекулах», *Докл. АН* **464**, 696-699 (2015) DOI: 10.1134/S0012501615100073.



14. A. Н. Правдивцев, К. Л. Иванов, А. В. Юрковская, Х.-М. Фит, Р. З. Сагдеев. «Новая импульсная последовательность для селективной регистрации мультиплетной спиновой поляризации», *Докл. АН* **465**, 54-57 (2015) DOI: 10.1134/S0012501615110044.
15. A. S. Kiryutin, A. V. Yurkovskaya, H.-M. Vieth, K. L. Ivanov. «Long-lived spin states as a source of contrast in magnetic resonance spectroscopy and imaging», *J. Magn. Reson.* **261**, 64-72 (2015) DOI: 10.1016/j.jmr.2015.10.004.
16. A. N. Pravdivtsev, K. L. Ivanov, A. V. Yurkovskaya, P. A. Petrov, R. Kaptein, H.-H. Limbach, H.-M. Vieth. «Spin polarization transfer mechanisms of SABRE: A magnetic field dependent study», *J. Magn. Reson.*, **261**, 73-82 (2015) DOI: 10.1016/j.jmr.2015.10.006.
17. A. S. Kiryutin, A. V. Yurkovskaya, N. N. Lukzen, H.-M. Vieth, K. L. Ivanov. «Exploiting adiabatically switched RF-field for manipulating spin hyperpolarization induced by parahydrogen», *J. Chem. Phys.*, **143**, 234203 (2015) DOI: 10.1063/1.4937392.



2014 год

18. N. N. Saprygina, O. B. Morozova, G. Grampp, A. V. Yurkovskaya. «Effect of Amino Group Charge on the Photooxidation Kinetics of Aromatic Amino Acids», *J. Phys. Chem. A*, **118**, 339-349 (2014) DOI: 10.1021/Jp4097919.
19. N. N. Saprygina, O. B. Morozova, T. V. Abramova, G. Grampp, A. V. Yurkovskaya. «Oxidation of Purine Nucleotides by Triplet 3,3',4,4'-Benzophenone Tetracarboxylic Acid in Aqueous Solution: pH-Dependence», *J. Phys. Chem. A*, **118**, 4966-4974 (2014) DOI: 10.1021/Jp5044464.
20. A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, H. Zimmermann, H.-M. Vieth, K. L. Ivanov. «Magnetic field dependent long-lived spin states in amino acids and dipeptides», *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16**, 7584-7594 (2014) DOI: 10.1039/c3cp55197k.
21. K. L. Ivanov, N. N. Lukzen. «Kinetics of target searching by means of two diffusion-like motions», *Chem. Phys.*, **435**, 14-20 (2014) DOI: 10.1016/j.chemphys.2014.03.001.
22. K. L. Ivanov, A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, H.-M. Vieth, R. Kaptein. «The role of level anti-crossings in nuclear spin hyperpolarization», *Prog. NMR Spectrosc.*, **81**, 1-36 (2014) DOI: 10.1016/j.pnmrs.2014.06.001.
23. A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, N. N. Lukzen, H.-M. Vieth, K. L. Ivanov. «Exploiting Level Anti-Crossings (LACs) in the rotating frame for transferring spin hyperpolarization», *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16**, 18707-18719 (2014) DOI: 10.1039/c4cp01445f.
24. M. S. Panov, A. N. Pravdivtsev, K. L. Ivanov, A. V. Yurkovskaya, H.-M. Vieth. «Coherent polarization transfer effects are crucial for interpreting low-field CIDNP data», *Appl. Magn. Reson.*, **45** (9), 893-900 (2014) DOI: 10.1007/s00723-014-0568-9.
25. A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, N. N. Lukzen, K. L. Ivanov, H.-M. Vieth. «Highly efficient polarization of spin-1/2 insensitive NMR nuclei by adiabatic passage through level anti-crossings», *J. Phys. Chem. Lett.*, **5**, 3421-3426 (2014) DOI: 10.1021/jz501754j.
26. A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, H.-M. Vieth, K. L. Ivanov. «High resolution NMR study of T₁ magnetic relaxation dispersion. IV. Proton relaxation in free amino acids and Met-enkephalin pentapeptide», *J. Chem. Phys.*, **141**, 155101 (2014) DOI: 10.1063/1.4897336.
27. A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, H.-M. Vieth, K. L. Ivanov. «Spin mixing at level anti-crossings in the rotating frame makes high-field SABRE feasible», *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16**, 24672-24675 (2014) DOI: 10.1039/c4cp03765k.
28. G. Buntkowsky, T. Gutmann, M. V. Petrova, K. L. Ivanov, U. Bommerich, M. Plaumann, J. Bernarding. «Dipolar Induced Para-Hydrogen-Induced Polarization», *Sol. State NMR*, **63-64**, 20-29 (2014) DOI: 10.1016/j.ssnmr.2014.07.002.

СОТРУДНИЧЕСТВО

Новосибирский Научный Центр (ННЦ):

д.ф.-м.н., проф. А. Б. Докторов (ИХКГ СО РАН, <http://str.kinetics.nsc.ru/CMS/index.php?id=380>);

д.ф.-м.н. Л. В. Кулик (ИХКГ СО РАН);

к.ф.-м.н. Д. В. Стась (ИХКГ СО РАН);

д.х.н. проф. О. С. Федорова (ИХБФМ СО РАН,

<http://www.niboch.nsc.ru/doku.php/ru/structure/labs/fed>)

Германия:

проф. Х.-М. Фит (Свободный университет Берлина, http://www.physik.fu-berlin.de/einrichtungen/alte_ags/ag-vieth)

проф. Г. Бунтковски, д-р Т. Гутманн (Технический университет Дармштадта, <http://www.chemie.tu-darmstadt.de/buntkowsky>)

проф. Х.-Х. Лимбах (Свободный университет Берлина, <http://userpage.chemie.fu-berlin.de/~limbach/>)

д-р Й-Б. Хёфенер (университетская клиника г. Фрайбурга, <https://www.uniklinik-freiburg.de/mr-en/members/current/hoevener/>)

Херберт Циммерманн (Институт общества Макса Планка, Гейдельберг, http://www.mpimf-heidelberg.mpg.de/working_groups/zimmermann)

проф. Й. Матысик (университет Лейпцига, <http://www.cidnp.net/>)

Нидерланды:

проф. Марк Бальдус (университет Утрехта, <http://www.uu.nl/staff/MBaldus/0>)

Проф. Роберт Каптейн (университет Утрехта, <http://www.nmr.chem.uu.nl/users/kaptein/>)

Япония:

проф. Такедзи Такуи, проф. Казунобу Сато (университет города Осака, <http://www.qcqi.sci.osaka-cu.ac.jp/ms/>)

Австрия:

проф. Г. Грампп (Технический университет Граца, <http://www.ptc.tugraz.at/grampp/>)



Лаборатория Магнитного Резонанса

Международный Томографический Центр СО РАН
г. Новосибирск



Мы применяем ЭПР спектроскопию к задачам химии, наук о материалах, биологии, физики.

НАШ АДРЕС

Международный Томографический Центр СО РАН

Институтская 3А

Новосибирск 630090

Россия

www.tomo.nsc.ru

КОНТАКТНЫЕ ДАННЫЕ КЛЮЧЕВЫХ СОТРУДНИКОВ



д.ф.-м.н.
Матвей Владимирович Федин

mfedin@tomo.nsc.ru

Тел. +7 (383) 330-12-76

заведующий лабораторией



к.ф.-м.н.
Сергей Леонидович Вебер

Sergey.Veber@tomo.nsc.ru

Тел. +7 (383) 330-75-47

Молекулярные магнетики,
терагерцовое излучение, ИК
спектроскопия, ВР ЭПР



к.ф.-м.н.
Олеся Анатольевна Крумкачева

olesya@tomo.nsc.ru

Тел. +7 (383) 330-75-47

Применение ЭПР к биологическим
задачам



к.ф.-м.н.
Алена Михайловна Шевелева

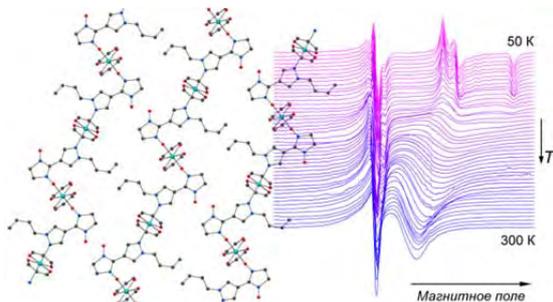
alena@tomo.nsc.ru

Тел. +7 (383) 330-75-47

Металл-органические каркасы и
микро/мезопористые среды

В лаборатории в 2015-2016 гг. работают 6 студентов/аспирантов.

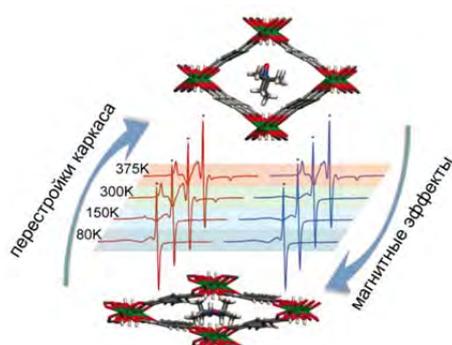
Функциональные магнитоактивные материалы



Развиты подходы применения ЭПР спектроскопии к исследованию термо- и фотопереключаемых молекулярных магнетиков на основе комплексов меди с нитроксильными радикалами.

Coord. Chem. Rev. 289–290 (2015) 341–356

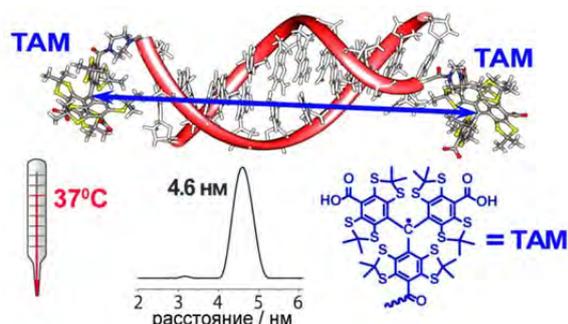
Металлоорганические каркасы



Нитроксильные радикалы, адсорбированные внутри пор металл-органических каркасов (MOF), позволяют эффективно применять методы стационарного и импульсного ЭПР для изучения структурных перестроек в MOF и взаимодействий «гость-хозяин».

J. Phys. Chem. Lett. 5 (2014) 20–24

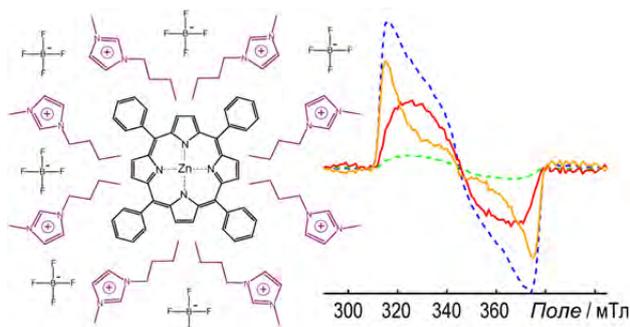
Спин-меченые биомолекулы



Использование новых типов спиновых меток (например, триарилметильных радикалов) и новых подходов к их введению позволяет изучать структуру биомолекул на нанометровой шкале методами импульсного ЭПР, в том числе при комнатных температурах.

J. Amer. Chem. Soc. 136 (2014) 9874–9877

Свойства ионных жидкостей



Необычные физико-химические свойства ионных жидкостей, в том числе эффекты микроструктурирования, могут быть эффективно изучены методом ЭПР с временным разрешением с использованием фотовозбужденных триплетных молекул.

J. Phys. Chem. B 119 (2015) 13440–13449

ОБОРУДОВАНИЕ

ЭПР спектрометр Bruker Elexsys E580 (9/34 ГГц)



Современный стационарный/импульсный спектрометр ЭПР X/Q частотных диапазонов (9/34 ГГц)

- Опции ENDOR/ELDOR
- Температурный диапазон от 3.7 до 300 К
- Возможности импульсного фотовозбуждения Nd:YAG лазером с $\lambda = 266, 355, 532$ и 1064 нм; эксимерным лазером с $\lambda = 308$ нм; стационарного облучения ртутной лампой высокого давления

Стационарный ЭПР спектрометр Bruker EMX (9 ГГц)



Стационарный спектрометр ЭПР X-диапазона (9 ГГц).

- Температурный диапазон от 80 до 400 К
- Возможности импульсного фотовозбуждения Nd:YAG лазером с $\lambda = 266, 355, 532$ и 1064 нм; эксимерным лазером с $\lambda = 308$ нм; стационарного облучения ртутной лампой высокого давления

Спектрометр ЭПР с временным разрешением (ВР ЭПР) (9 ГГц)



Спектрометр ЭПР с временным разрешением для фотохимических и фотофизических исследований.

- Временное разрешение 40-100 нс
- Наличие проточной системы
- Температурный диапазон от 4 до 300 К
- Возможности импульсного фотовозбуждения Nd:YAG лазером с $\lambda = 266, 355, 532$ и 1064 нм; эксимерным лазером с $\lambda = 308$ нм; терагерцовым лазерным излучением Новосибирского лазера на свободных электронах (ЛСЭ, 1-8 THz)

ИК Фурье-спектрометр Bruker Vertex 80v с ИК микроскопом HYPERION 2000



Позволяет регистрировать ИК спектры жидких и твердых веществ в диапазоне от 50000 до 5 см^{-1} .

- Температурный диапазон ИК спектрометра от 3.7 до 300 К, ИК микроскопа от 77 до 300 К
- Возможности импульсного фотовозбуждения Nd:YAG лазером с $\lambda = 266, 355, 532$ и 1064 нм; стационарного облучения ртутной лампой высокого давления

ПУБЛИКАЦИИ 2014-2015 ГГ

1. M.V. Fedin, S.L. Veber, E.G. Bagryanskaya, V.I. Ovcharenko // Electron paramagnetic resonance of switchable copper-nitroxide-based molecular magnets: An indispensable tool for intriguing systems // *Coord. Chem. Rev.* 289–290 (2015) 341–356.
2. M.A. Nasalevich, R. Becker, E.V. Ramos-Fernandez, S. Castellanos, S.L. Veber, M.V. Fedin, F. Kapteijn, J.N.H. Reek, J.I. van der Vlugt, J. Gascon // Co@NH₂-MIL-125(Ti): cobaloxime-derived metal-organic framework-based composite for light-driven H₂ production // *Environ. Sci.* 8 (2015) 364–375.
3. I.Yu. Barskaya, S.L. Veber, S.V. Fokin, E.V. Tretyakov, E.G. Bagryanskaya, V.I. Ovcharenko, M.V. Fedin // Structural specifics of light-induced metastable states in copper(II)-nitroxide molecular magnets // *Dalton Trans.* 44 (2015) 20883–20888.
4. A.A. Malygin, D.M. Graifer, M.I. Meschaninova, A.G. Venyaminova, O.A. Krumkacheva, M.V. Fedin, G.G. Karpova, E.G. Bagryanskaya // Doubly spin-labeled RNA as an EPR reporter for studying arrangement of multicomponent supramolecular assemblies // *Biophys. J.* 109 (2015) 2637–2643.
5. S.L. Veber, E.A. Suturina, M.V. Fedin, K.N. Boldyrev, K.Y. Maryunina, R.Z. Sagdeev, V.I. Ovcharenko, N.P. Gritsan, E.G. Bagryanskaya // FTIR Study of Thermally Induced Magnetostructural Transitions in Breathing Crystals // *Inorg. Chem.* 54 (2015) 3446–3455.
6. J. Jung, B. Le Guennic, M.V. Fedin, V.I. Ovcharenko, C.J. Calzado // Mechanism of Magnetostructural Transitions in Copper-Nitroxide-Based Switchable Molecular Magnets: Insights from ab Initio Quantum Chemistry Calculations // *Inorg. Chem.* 54 (2015) 6891–6899.
7. M.V. Fedin, S.L. Veber, E.G. Bagryanskaya, G.V. Romanenko, V.I. Ovcharenko // Spatial distribution of phases during gradual magnetostructural transitions in copper(II)-nitroxide based molecular magnets // *Dalton Trans.* 44 (2015) 18823–18830.
8. A.A. Kuzhelev, D.V. Trukhin, O.A. Krumkacheva, R.K. Strizhakov, O.Yu. Rogozhnikova, T.I. Troitskaya, M.V. Fedin, V.M. Tormyshev, E.G. Bagryanskaya // Room-Temperature Electron Spin Relaxation of Triarylmethyl Radicals at the X- and Q-Bands // *J. Phys. Chem. B* 119 (2015) 13630–13640.
9. G.Yu. Shevelev, O.A. Krumkacheva, A.A. Lomzov, A.A. Kuzhelev, D.V. Trukhin, O.Yu. Rogozhnikova, V.M. Tormyshev, D.V. Pyshnyi, M.V. Fedin, E.G. Bagryanskaya // Triarylmethyl Labels: Toward Improving the Accuracy of EPR Nanoscale Distance Measurements in DNAs // *J. Phys. Chem. B* 119 (2015) 13641–13648.
10. M.Yu. Ivanov, S.L. Veber, S.A. Prikhod'ko, N.Yu. Adonin, E.G. Bagryanskaya, M.V. Fedin // Probing Microenvironment in Ionic Liquids by Time-Resolved EPR of Photoexcited Triplets // *J. Phys. Chem. B* 119 (2015) 13440–13449.
11. E.G. Bagryanskaya, O.A. Krumkacheva, M.V. Fedin, S.R.A. Marque // Development and Application of Spin Traps, Spin Probes, and Spin Labels // *Methods in Enzymology* 563 (2015) 365–396.
12. S.E. Tolstikov, N.A. Artiukhova, G.V. Romanenko, A.S. Bogomyakov, E.M. Zueva, I.Yu. Barskaya, M.V. Fedin, K.Yu. Maryunina, E.V. Tretyakov, R.Z. Sagdeev, V.I. Ovcharenko // Heterospin complex showing spin transition at room temperature // *Polyhedron* 100 (2015) 132–138.
13. E.V. Tretyakov, G.V. Romanenko, S.L. Veber, M.V. Fedin, A.V. Polushkin, A.O. Tkacheva, V.I. Ovcharenko // Cu(hfac)₂ Complexes with Nitronyl Ketones Structurally Mimicking Nitronyl Nitroxides in Breathing Crystals // *Aust. J. Chem.* 68 (2015) 970–980.
14. A.M. Sheveleva, I.K. Shundrina, S.L. Veber, A.D. Buhtojarova, V.V. Russkih, V.V. Shelkovnikov, M.V. Fedin, E.G. Bagryanskaya // Inherent Microporosity and Photostability of Fluoroacrylic Polymer Films Studied by Electron Paramagnetic Resonance of Nitroxide Spin Probes // *Appl. Magn. Reson.* 46 (2015) 523–540.

15. W. Kaszub, A. Marino, M. Lorenc, E. Collet, E.G. Bagryanskaya, E.V. Tretyakov, V.I. Ovcharenko, M.V. Fedin // Ultrafast Photoswitching in a Copper-Nitroxide-Based Molecular Magnet // *Angew. Chem. Int. Ed.* 53 (2014) 10636–10640.
16. G.Yu. Shevelev, O.A. Krumkacheva, A.A. Kuzhelev, A.A. Lomzov, O.Yu. Rogozhnikova, D.V. Trukhin, T.I. Troitskaya, V.M. Tormyshev, M.V. Fedin, D.V. Pyshnyi, E.G. Bagryanskaya // Physiological-Temperature Distance Measurement in Nucleic Acid using Triarylmethyl-Based Spin Labels and Pulsed Dipolar EPR Spectroscopy // *J. Amer. Chem. Soc.* 136 (2014) 9874–9877.
17. I.Yu. Barskaya, E.V. Tretyakov, R.Z. Sagdeev, V.I. Ovcharenko, E.G. Bagryanskaya, K.Yu. Maryunina, T. Takui, K. Sato, M.V. Fedin // Photoswitching of a Thermally Unswitchable Molecular Magnet $\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{i-Pr}}$ Evidenced by Steady-State and Time-Resolved Electron Paramagnetic Resonance // *J. Amer. Chem. Soc.* 136 (2014) 10132–10138.
18. R.K. Strizhakov, E.V. Tretyakov, A.S. Medvedeva, V.V. Novokshonov, V.G. Vasiliev, V.I. Ovcharenko, O.A. Krumkacheva, M.V. Fedin, E.G. Bagryanskaya // Permethyl-b-Cyclodextrin Spin-Labeled with Nitronyl Nitroxide: Synthesis and EPR Study // *Appl. Magn. Reson.* 45 (2014) 1087–1098.
19. E.S. Babaylova, A.V. Ivanov, A.A. Malygin, M.A. Vorobjeva, A.G. Venyaminova, Y.F. Polienko, I.A. Kirilyuk, O.A. Krumkacheva, M.V. Fedin, G.G. Karpova, E.G. Bagryanskaya // A versatile approach for site-directed spin labeling and structural EPR studies of RNAs // *Org. Biomol. Chem.* 12 (2014) 3129–3136.
20. S. Tolstikov, E. Tretyakov, S. Fokin, E. Suturina, G. Romanenko, A. Bogomyakov, D. Stass, A. Maryasov, M. Fedin, N. Gritsan, V. Ovcharenko // C(sp²)-Coupled Nitronyl and Imino Nitroxide Diradicals // *Chem. Eur. J.* 20 (2014) 2793–2803.
21. A.M. Sheveleva, D.I. Kolokolov, A.A. Gabrienko, A.G. Stepanov, S.A. Gromilov, I.K. Shundrina, R.Z. Sagdeev, M.V. Fedin, E.G. Bagryanskaya // Structural Dynamics in “Breathing” Metal-Organic Framework Studied by Electron Paramagnetic Resonance of Nitroxide Spin Probes // *J. Phys. Chem. Lett.* 5 (2014) 20–24.
22. V.V. Novikov, I.V. Ananyev, A.A. Pavlov, M.V. Fedin, K.A. Lyssenko, Y.Z. Voloshin // Spin-Crossover Anticooperativity Induced by Weak Intermolecular Interactions // *J. Phys. Chem. Lett.* 5 (2014) 496–500.



Лаборатория физических методов исследования

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова
Сибирское отделение Российской академии наук

В составе Лаборатории имеются две группы, занимающиеся магнитным резонансом: группа ядерного магнитного резонанса и группа электронного парамагнитного резонанса и электрохимии.

НИОХ СО РАН

Российская Федерация,
630090, г. Новосибирск,
пр. Академика Лаврентьева, д.
9

Tel.: +7 (383) 330-88-50

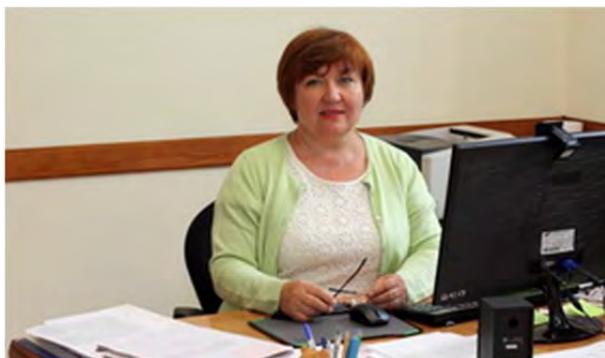
Fax: +7 (383) 330-97-52

benzol@nioch.nsc.ru

www.nioch.nsc.ru



КОНТАКТЫ



д.ф.-м.н., профессор
Багрянская Елена Григорьевна

тел. +7 (383) 330-88-50

egbagryanskaya@nioch.nsc.ru

заведующая лабораторией,
директор НИОХ СО РАН



к.х.н.
Маматюк Виктор Ильич

тел. +7 (383) 330-69-60

vim@nioch.nsc.ru

руководитель
группы ЯМР



д.х.н.
**Шундрин Леонид
Анатольевич**

тел. +7 (383) 330-94-32
shundrin@nioch.nsc.ru

руководитель
группы ЭПР



Группа ЯМР состоит из высококвалифицированных специалистов, способных решать разнообразные исследовательские задачи. Основные направления связаны с определением строения сложных органических соединений, исследованием механизмов органических реакций.



**Сальников Георгий
Ефимович, с.н.с.**
тел. +7 (383) 330-55-04
sge@nioch.nsc.ru



**Шернюков Андрей
Владимирович, к.х.н., н.с.**
тел. +7 (383) 330-55-04
andreysh@nioch.nsc.ru



**Корчагина Дина
Владимировна, к.х.н., с.н.с.**
тел. +7 (383) 330-55-04
korchaga@nioch.nsc.ru



**Шакиров Махмут
Минахметович, ведущий
инженер**
тел. +7 (383) 330-55-04
mmsh@nioch.nsc.ru



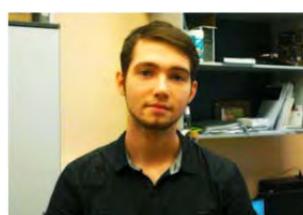
Чуйков Игорь Петрович,
к.х.н., н.с.
тел. +7 (383) 330-55-04
chip@nioch.nsc.ru



**Фадеев Дмитрий
Сергеевич, м.н.с.**
тел. +7 (383) 330-55-04
dsf@nioch.nsc.ru



**Плешкова Надежда
Владимировна, м.н.с.**
аспирант
тел. +7 (383) 330-55-04
nadia789@nioch.nsc.ru



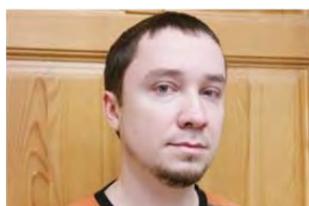
**Свиридов Евгений
Александрович,**
лаборант-исследователь,
магистрант НГУ
тел. +7 (383) 330-82-51
sviridov@nioch.nsc.ru



**Кандаурова Вера
Васильевна, техник 1 кат.**
тел. +7 (383) 330-55-04
vera@nioch.nsc.ru



**Скорова Анна
Борисовна, ведущий
инженер**
тел. +7 (383) 330-55-04
anna@nioch.nsc.ru



**Компаньков Николай
Борисович, ведущий
инженер**
тел. +7 (383) 330-55-04



**Кригер Дарья
Владимировна, техник 1
кат.**
тел. +7 (383) 330-55-04



Группа ЭПР состоит из высококвалифицированных специалистов, способных решить разнообразные исследовательские задачи. Основные направления исследований – свободные радикалы, механизмы химических и электрохимических реакций с участием парамагнитных интермедиатов, ЭПР-томография *in vivo* живых систем.



Марк Сильван Раймонд Альберт (Франция), д.х.н., профессор
тел. +7 (383) 330-55-30
sylvain.marque@univ-amu.fr



Иртегова Ирина Геннадьевна, к.х.н., с. н.с.
тел. +7 (383) 330-94-32
irteg@nioch.nsc.ru



Халфина Ирина Александровна, к.х.н. с.н.с.,
тел. +7 (383) 330-78-60
khalfina@nioch.nsc.ru



Васильева Надежда Васильевна, к.х.н., с. н.с.
тел. +7 (383) 330-94-32
vasileva@nioch.nsc.ru



Кашлакова Вера Ивановна, ст. лаборант
тел. +7 (383) 330-94-32



Городецкий Артем Александрович, м.н.с., аспирант НГУ
тел. +7 (383) 330-94-32
gorodaa@nioch.nsc.ru

ОБОРУДОВАНИЕ

ЯМР спектрометр Bruker AV-600



Трехканальный спектрометр позволяет проводить ЯМР эксперименты:

- ^1H $\{^{13}\text{C}, \text{X}\}$ и ^1H $\{^2\text{D}, ^{19}\text{F}, \text{X}\}$
- ^{13}C $\{^1\text{H}/^{19}\text{F}, \text{X}\}$
- любое X-ядро $\{^1\text{H}, ^2\text{D}\}$
- корреляции ядер ^{13}C и других X-ядер
- эксперименты, требующие Z-градиента

ЯМР спектрометр Bruker DRX-500



Двухканальный спектрометр позволяет проводить ЯМР эксперименты:

- ^1H $\{\text{X}\}$
- любое X-ядро $\{^1\text{H}\}$
- эксперименты, требующие Z-градиента

ЯМР спектрометр Bruker AV-400



Двухканальный спектрометр позволяет проводить ЯМР эксперименты в поточном режиме:

- ^1H $\{\text{X}\}$, ^{19}F $\{^1\text{H}\}$
- любое X-ядро $\{^1\text{H}\}$

ЯМР спектрометр Bruker AV-300



Двухканальный спектрометр позволяет проводить ЯМР эксперименты в поточном режиме:

- ^1H {X}, ^{19}F { ^1H }
- любое X-ядро { ^1H }

ЯМР спектрометр Bruker AV-200



Двухканальный спектрометр ЯМР для экспериментов с динамической поляризацией

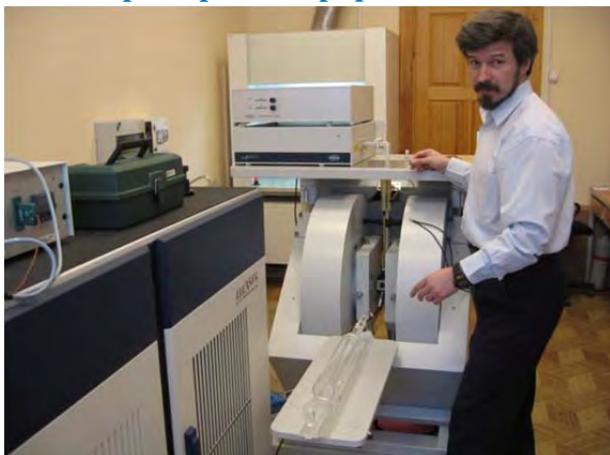
ЭПР спектрометр ESP-300D (Bruker)



Позволяет регистрировать спектры ЭПР в X- диапазоне.

- оборудован двойным резонатором X-диапазона

ЭПР спектрометр – томограф ELEXSYS-E540



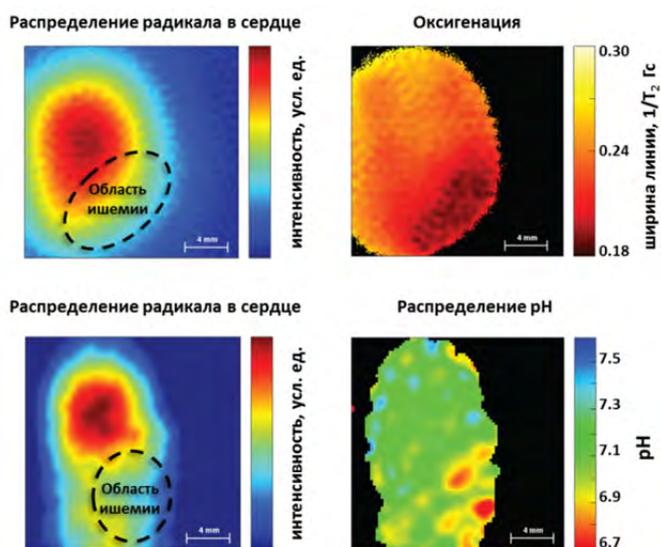
Позволяет регистрировать спектры ЭПР в X- и L- диапазонах.

- оборудован 3D градиентными катушками с максимальным значением градиента 40 G/cm.
- позволяет измерять 1D, 2D, 3D ЭПР-томограммы в L- и X-диапазонах.
- Сменные резонаторы: высокочастотный и двойной X-диапазона, резонаторы L-диапазона, поверхностная катушка L-диапазона



ЭПР томография L-диапазона *in vivo*
(Локализация нитроксильных радикалов в печени мыши)

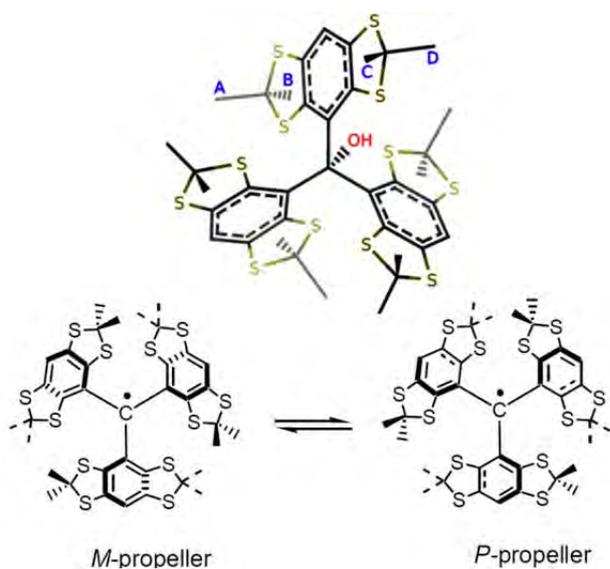
РЕПРЕЗЕНТАТИВНЫЕ ПРИМЕРЫ ИССЛЕДОВАНИЙ



Визуализация оксигенации и pH ишемизированного сердца крысы методом томографии ЭПР

Functional electron paramagnetic resonance imaging of ischemic rat heart: Monitoring of tissue oxygenation and pH

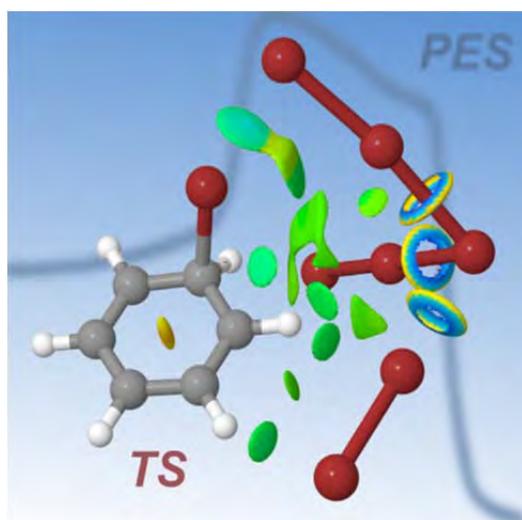
Magnetic Resonance in Medicine,
doi: [10.1002/mrm.25867](https://doi.org/10.1002/mrm.25867)



Экспериментальное установление механизма обращения хирального молекулярного пропеллера для новых спиновых меток

Triarylmethanols with Bulky Aryl Groups and the NOESY/EXSY Experimental Observation of a Two-Ring-Flip Mechanism for the Helicity Reversal of Molecular Propellers

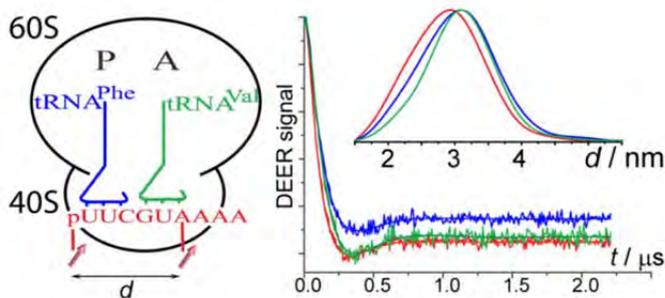
Eur.J. Org. Chem., 2012, N 3, 623-629.
doi: [10.1002/ejoc.201101243](https://doi.org/10.1002/ejoc.201101243)



Экспериментальное и теоретическое исследование некаталитической реакции бромирования бензола

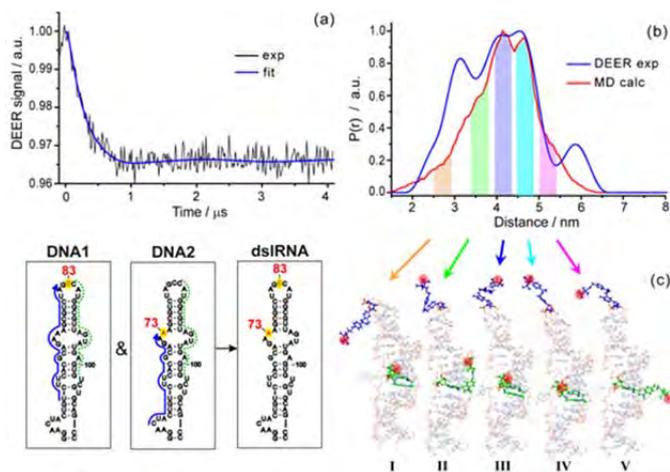
Noncatalytic bromination of benzene: A combined computational and experimental study

Journal of Computational Chemistry, V. 37, N 2, 15
January 2016, Pp 210-225
doi: [10.1002/jcc.23985](https://doi.org/10.1002/jcc.23985)



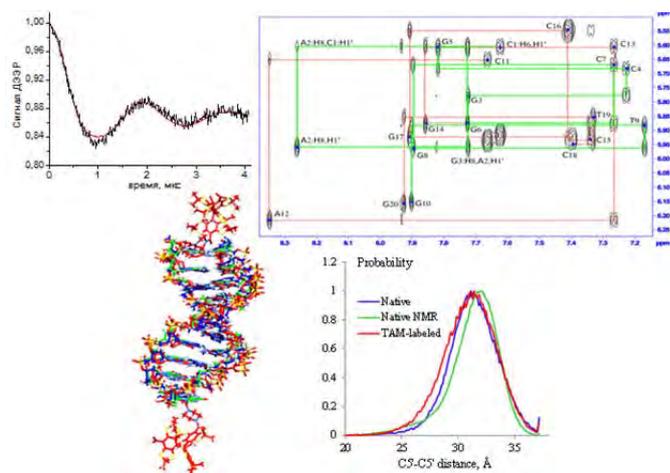
Изучение структурных перестроек в РНК IRES ВГС, индуцируемых связыванием с рибосомным белком S5 человека.

Doubly spin-labeled RNA as an EPR reporter for studying arrangement of multicomponent supramolecular assemblies”,
Biophysical journal, 2015, V. 109, Pp 2637-2643, doi: [10.1016/j.bpj.2015.10.042](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2015.10.042)



Исследование структуры и функций протеинов и нуклеиновых кислот методами магнитного резонанса

Site-Directed Spin Labeling of Long Natural RNAs Exemplified with Hepatitis C Virus RNA Internal Ribosome Entry Site, NAR, 2016, submitted



Институт катализа СО РАН г. Новосибирск

Группы ЯМР спектроскопии в твердом теле

АДРЕС

Институт катализа им. Г.К. Борескова
пр. Лаврентьева, д. 5
630090, г. Новосибирск



АППАРАТУРНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ

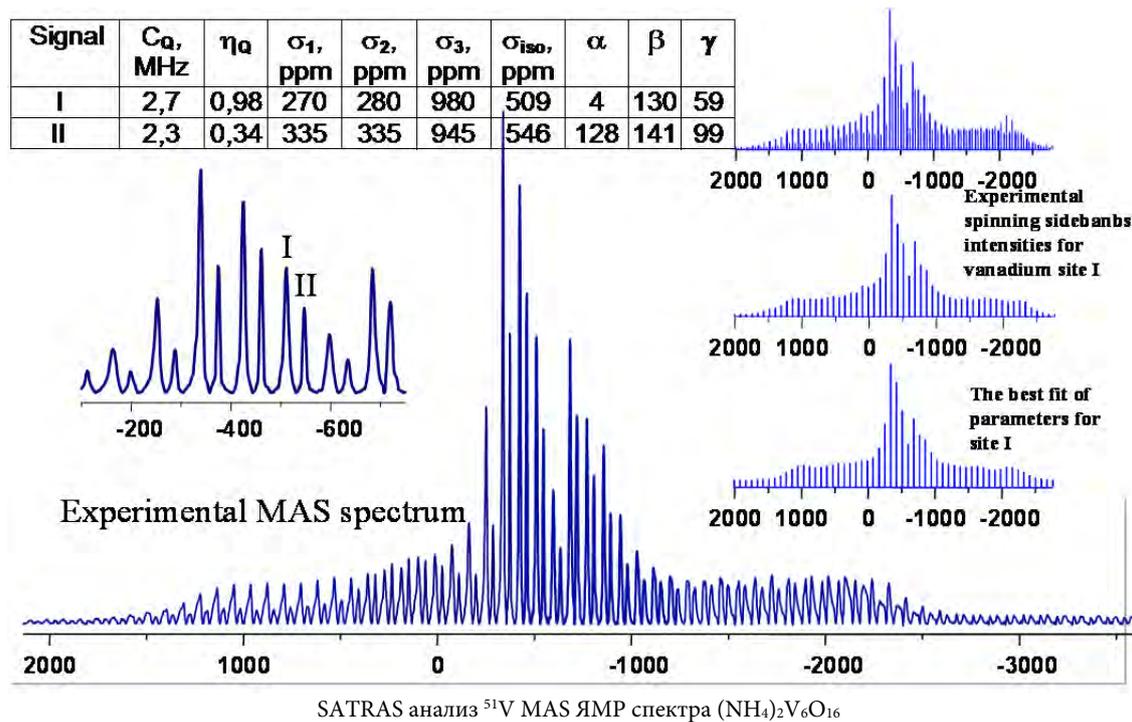
Спектрометры Bruker AVANCE-400 (магнитное поле 9.4 Т) и Bruker AVANCE-400/микротомограф (сверхэкранированный магнит 9.4 Т) с характерным набором датчиков для получения ЯМР спектров жидкостей и твердых тел:

- датчики высокого разрешения для жидкостей во всей области частот;
- широкополосные датчики для всей области частот и температур от +100 до -150 °С;
- многоядерные двухканальные X/¹H датчики для экспериментов с вращением образца под магическим углом со скоростью вращения образца до 7 кГц; 4, 5 мм – со скоростью вращения образцов до 15 кГц; 2.5 мм – со скоростью вращения образца до 35 кГц; 1.3 мм – со скоростью вращения образца до 70 кГц; с возможностью проведения экспериментов с кросс-поляризацией;
- MICRO2.5 датчик для микротомографии с градиентом для широкополосной системы.

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ

1. Методики анализа спектров ЯМР твердых тел квадрупольных ядер с полуцелым спином с определением параметров всех типов взаимодействий (параметров тензора ядерного квадрупольного взаимодействия, тензора магнитного экранирования, а также взаимной ориентации тензоров):

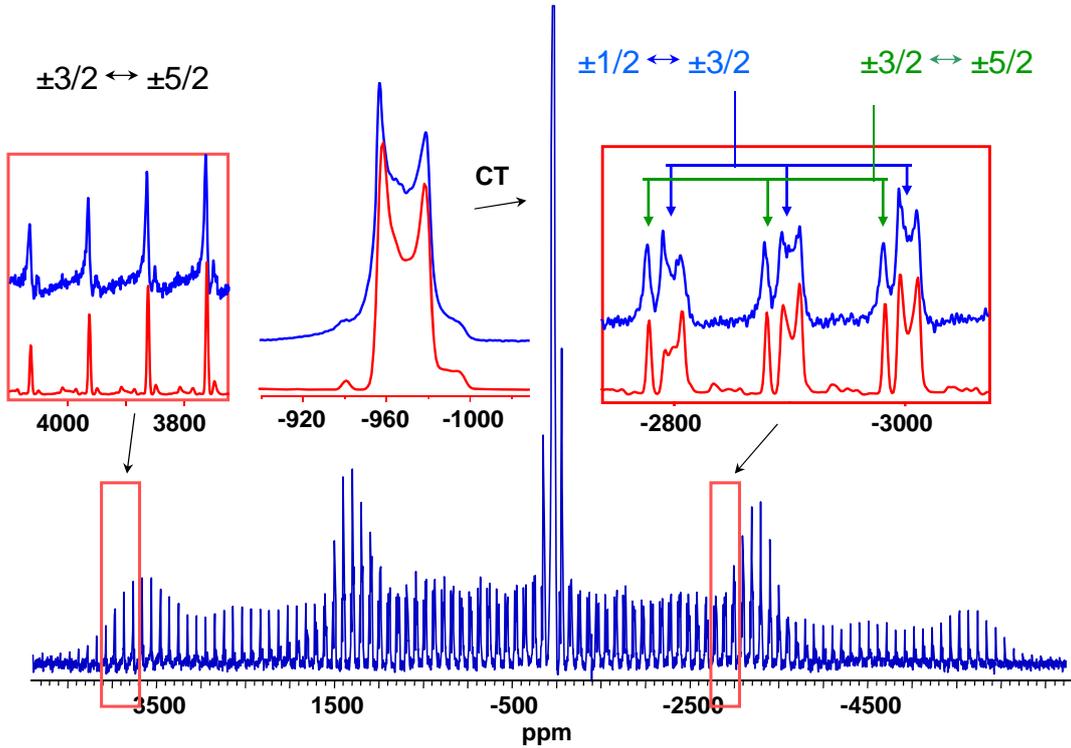
а) SATRAS (SATellite TRAnsiTion Spectroscopy) – детальная спектроскопия сателлитов вращения для центрального и боковых переходов в спектрах MAS;



б) MQMAS (Multiple-Quantum MAS) – спектроскопия многоквантовых квадрупольных переходов;

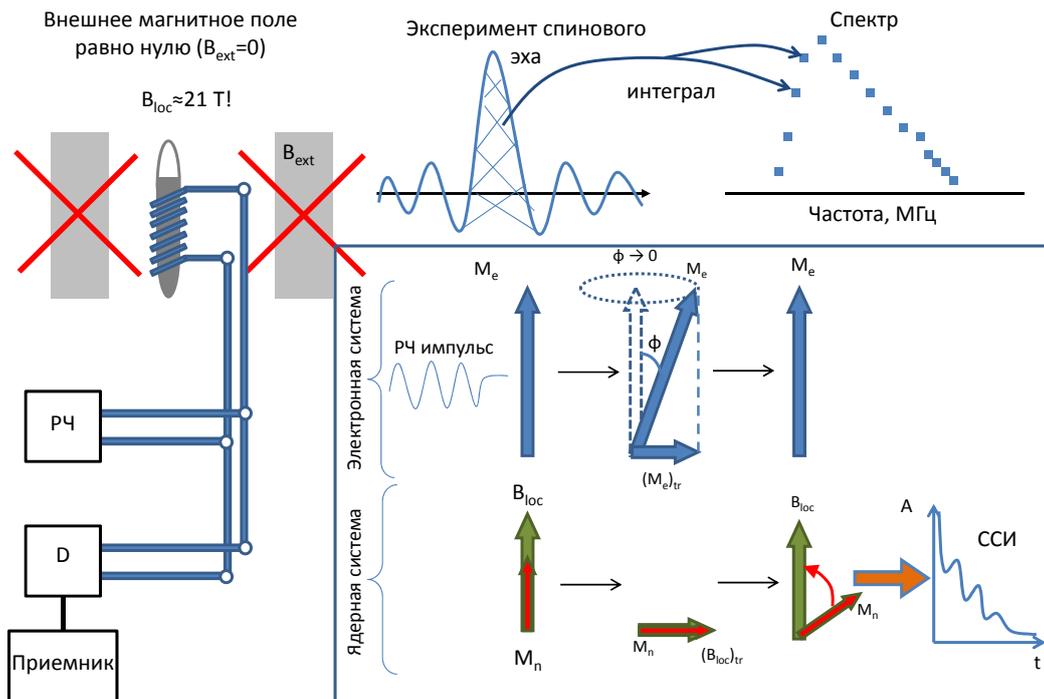
в) MASSA (Magic angle spinning And Static Spectra Analysis) – одновременный анализ статических спектров и спектров MAS (по форме и интенсивности квадрупольно уширенных сателлитов вращения в спектре MAS ЯМР центрального перехода);

d) SSTMAS (Spinning sideband analysis of the selected transitions) – детальная спектроскопия спутников вращения выбранных переходов.

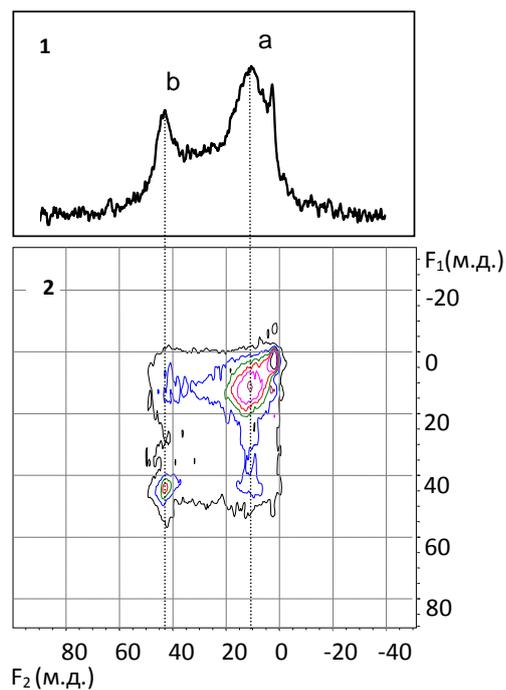


SSTMAS анализ ^{93}Nb MAS ЯМР спектра Li_3NbO_4 : синий – экспериментальный спектр, полученный в поле 9.4 Т, в 4 мм датчике с вращением образца $\nu_r = 10$ кГц; показаны спутниковые переходы $\pm 3/2 \leftrightarrow \pm 5/2$ и центральный переход, красным показан теоретический спектр

2. ^{59}Co ЯМР во внутреннем поле образца



3. Корреляционная спектроскопия



1 – спектр ^{129}Xe ЯМР ксенона, адсорбированного на углеродных нанотрубках. 2 – двумерный спектр EXSY ^{129}Xe ЯМР ксенона адсорбированного на углеродных нанотрубках; время смешения 10 мс, равновесное давление ксенона ~100 кПа.

4. Специально изготовленный высокотемпературный (до 600 °С) датчик для изучения расплавов

СПЕЦИАЛИСТЫ



Лапина Ольга Борисовна, д.х.н., руководитель группы ЯМР спектроскопии в твердом теле

Область интересов: строение и механизм формирования активных центров твердых катализаторов методами ЯМР спектроскопии высокого разрешения в твердом теле; ЯМР квадрупольных ядер и ЯМР при высоких температурах.

olga@catalysis.ru

8 (383) 3269 505



Шубин Александр Аркадьевич, к.ф.-м.н., с.н.с. лаборатории квантовой химии

Область интересов: моделирование структур и расчет каталитической активности гетерогенных катализаторов методами квантовой химии, как в кластерном, так и в периодическом вариантах.

a.a.shubin@catalysis.ru

8 (383) 3269 649



Хабибулин Джалил Фаридович, к.ф.-м.н., с.н.с. группы ЯМР в спектроскопии в твердом теле

Область интересов: ЯМР спектроскопия в твердом теле, ЯМР квадрупольных ядер, корреляционная ЯМР спектроскопия, ЯМР гидроксильных групп.

jalil@catalysis.ru

8 (383) 3269 505



Андреев Андрей Сергеевич, к.ф.-м.н., н.с. группы ЯМР в спектроскопии в твердом теле

Область интересов: ЯМР спектроскопия в твердом теле, ^{59}Co ЯМР во внутреннем поле образца, ^{129}Xe ЯМР адсорбированного ксенона.

aandreev@catalysis.ru

8 (383) 3269 505



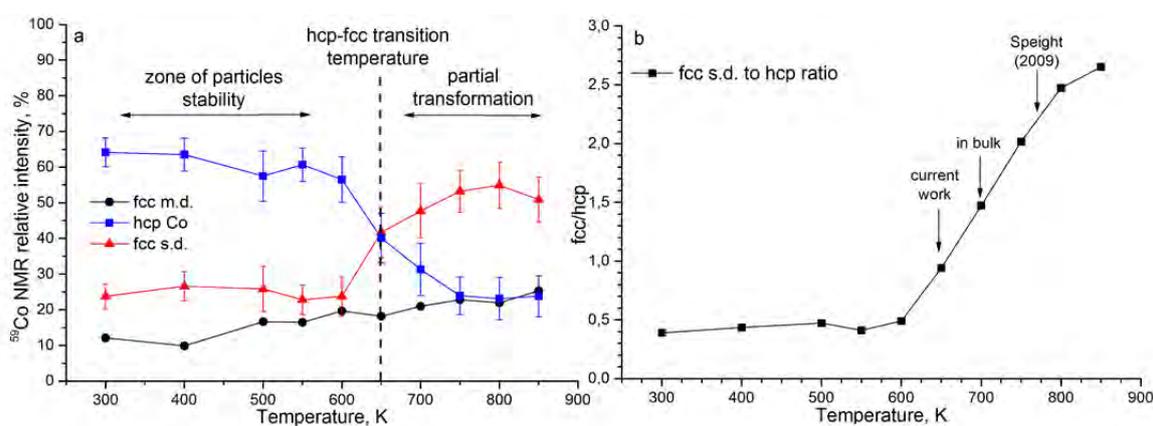
Папуловский Евгений Сергеевич, м.н.с. группы ЯМР в спектроскопии в твердом теле

Область интересов: моделирование структур и расчет ЯМР параметров методами квантовой химии, как в кластерном, так и в периодическом вариантах.

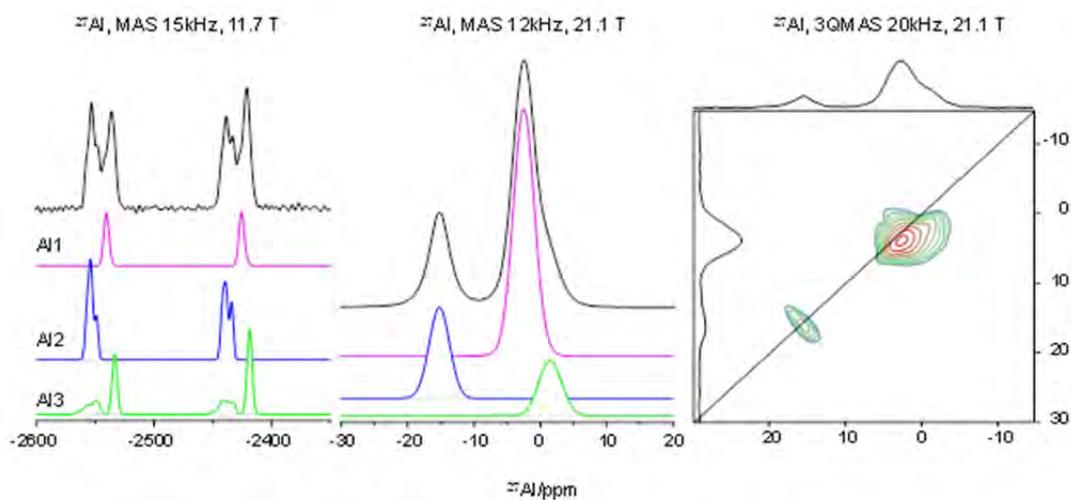
fyr@catalysis.ru

8 (383) 3269 505

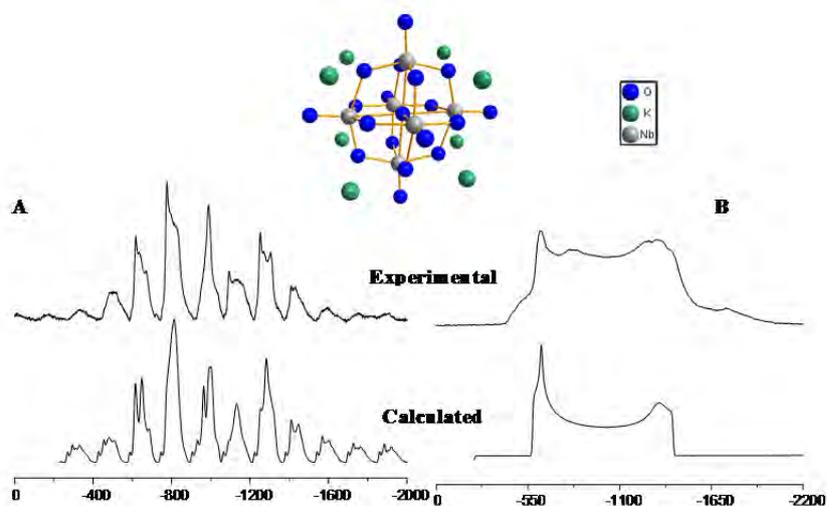
НЕКОТОРЫЕ ПРИМЕРЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ



A.S. Andreev, O.B. Lapina, J.-B. d'Espinose de Lacaillerie, A. Gerashenko. Supported on $\beta\text{-SiC}$ Co metal FTS catalysts thermal stability and hcp-fcc allotropic transformation probed *in situ* by ferromagnetic NMR. PCCP, 2015, vol. 17, is. 22, pp 14598-14604, (DOI: 10.1039/C4CP05327C).

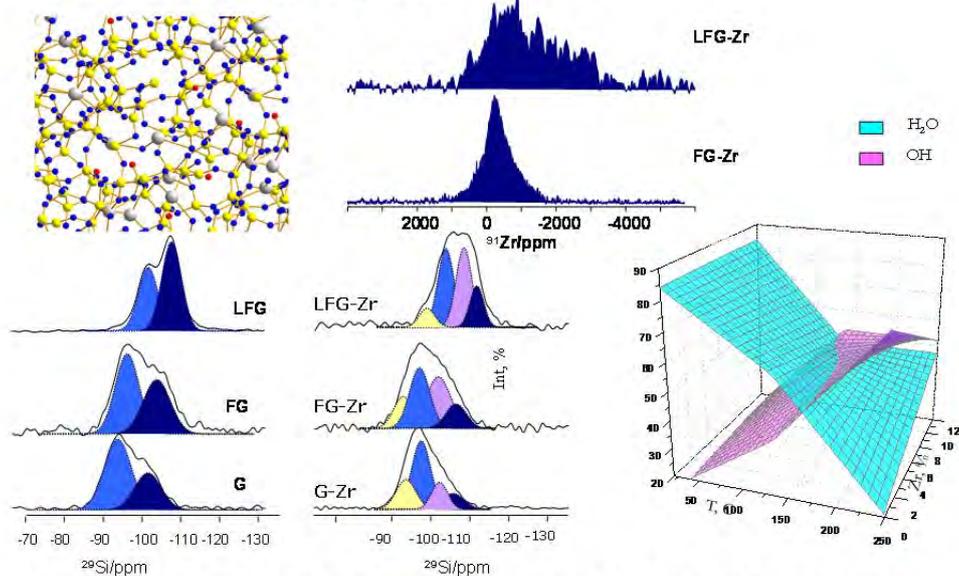


Evgeniy Papulovskiy, Dzhilil F. Khabibulin, Victor V. Terskikh, Eugene A. Paukshtis, Valentina M. Bondareva, Aleksandr A. Shubin, Andrey S. Andreev, and Olga Lapina, J. Phys. Chem. C, 2015, 119, 10400–10411.



E. Papulovskiy, A.A. Shubin, V.V. Terskikh, C. Pickard and O.B. Lapina, "Theoretical and experimental insights into applicability of solid-state ^{93}Nb NMR in catalysis", *Physical Chemistry Chemical Physics* 15 (2013) 5115–5131.

Строение цирконий-силикатных стекловолокон по данным ^1H , ^{29}Si , ^{91}Zr , ^{23}Na ЯМР



O. B. Lapina, D. F. Khabibulin, V. V. Terskikh, Multinuclear NMR Study of Silica Fiberglass Modified with Zirconia, *SSNMR*, 39 (2011) 47–57. (invited review)

ОБЗОРЫ

O.B. Lapina, D.F. Khabibulin, A.A. Shubin, V.V. Terskikh, Practical aspects of ^{51}V and ^{93}Nb solid-state NMR spectroscopy and applications to oxide materials, *Prog.Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.* 53 (2008) 128–191, doi:10.1016/j.pnmrs.2007.12.001.

O.B. Lapina, V.V. Terskikh, Quadrupolar Metal NMR of Oxide Materials Including Catalysts, in *Encyclopedia of Magnetic Resonance*, eds. Robin K Harris and Roderick E Wasylshen, John Wiley & Sons, Ltd., 2011, 21 p.

O.B. Lapina, V.V. Terskikh 'Quadrupolar Metal NMR of Oxide Materials Including Catalysts' Chapter 27, in *NMR of Quadrupolar Nuclei in Solid Materials*, Wasylshen, R.E., Ashbrook, S.E. and Wimperis, S. (eds). John Wiley & Sons Ltd, Chichester, UK, 2012, pp 467-494.

РАБОТЫ 2014-2015 ГГ.

Natalya Bulina, Marina Chaikina, Andrey Andreev, Olga Lapina, Arcady Ishchenko, Igor Prosanov, Konstantin Gerasimov, and Leonid Solovyov, Mechanochemical Synthesis of SiO_4^{4-} -Substituted Hydroxyapatite, Part II – Reaction Mechanism, Structure, and Substitution Limit, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2014, 28, 4810–4825, DOI:10.1002/ejic.201402246.

A.S. Andreev, O.B. Lapina, S.V. Cherepanova, A New Insight into Cobalt Metal Powder Internal Field ^{59}Co NMR Spectra, *Appl. Magn. Reson.*, 45(10), 2014, 1009-1017, DOI 10.1007/s00723-014-0580-0.

D.V. Dudina, O.I. Lomovsky, K.R. Valeev, S.F. Tikhov, N.N. Boldyreva, A.N. Salanov, S.V. Cherepanova, V.I. Zaikovskii, A.S. Andreev, O.B. Lapina, V.A. Sadykov, Phase evolution during early stages of mechanical alloying of Cu-13wt.%Al powder mixtures in a high-energy ball mill, *Journal of Alloys and Compounds* 629 (2015) 343–350, doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.12.120>.

Evgeniy Papulovskiy, Dzhalil F. Khabibulin, Victor V. Terskikh, Eugene A. Paukshtis, Valentina M. Bondareva, Aleksandr A. Shubin, Andrey S. Andreev, and Olga Lapina, Effect of Impregnation on the Structure of Niobium Oxide/Alumina Catalysts Studied by Multinuclear Solid-State NMR, FTIR, and Quantum Chemical Calculations, *J. Phys. Chem. C*, 2015, 119, 10400–10411, DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b01616.

Andrey S. Andreev, Jean-Baptiste d'Espinose de Lacaillerie, Olga B. Lapina and Alexander Gerashenko, Thermal stability and hcp-fcc allotropic transformation in supported Co metal catalysts probed near operando by ferromagnetic NMR, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17 (2015) 14598–14604, DOI: 10.1039/C4CP05327C.

Группа ЯМР спектроскопии каталитических превращений углеводородов Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН

КОНТАКТНЫЕ ДАННЫЕ

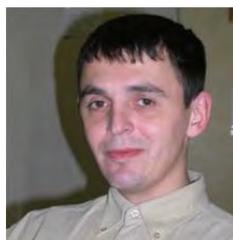
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
пр. Академика Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия, 630090, bic@catalysis.ru

РУКОВОДИТЕЛЬ ГРУППЫ



Д.Х.Н., в.н.с
Степанов Александр Григорьевич
stepanov@catalysis.ru

КЛЮЧЕВЫЕ СОТРУДНИКИ ГРУППЫ



К.Х.Н., с.н.с
Лузгин Михаил Владимирович
luzgin@catalysis.ru



К.Х.Н., н.с
Арзуманов Сергей Суренович
arzumanov@catalysis.ru



К.Х.Н., н.с.
Габриенко Антон Алексеевич
gabrienko@catalysis.ru



К.Ф-м.н., н.с.
Колоколов Даниил Игоревич
kdi@catalysis.ru

ОБОРУДОВАНИЕ

ЯМР спектрометр Bruker Avance-400 (9.4 Т)



Двухканальный (X, ^1H) спектрометр твердого тела, оборудованный высокомоощным (1кВт) передатчиком, температурным блоком, пневматическим блоком для экспериментов с вращением образца под “магическим углом” (MAS).

Имеются широкополосные датчики:

- диапазон частот от ^{105}Pd (18.3 МГц) до ^{31}P (161.9 МГц)
- температура от -170°C до $+250^\circ\text{C}$

Имеются датчики MAS:

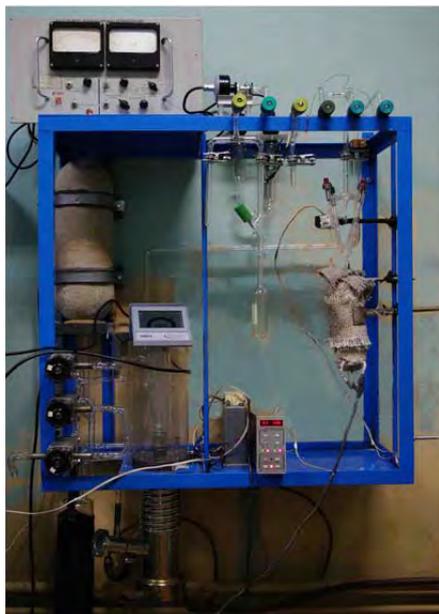
- диапазон частот X канала от ^{15}N (40.5 МГц) до ^{31}P (161.9 МГц)
- температура от -100°C до $+300^\circ\text{C}$
- диаметр ротора 7.0, 4.0, 2.5 мм. Максимальная скорость вращения 7, 15, 35 кГц, соответственно.

Установка для осуществления экспериментов MAS ЯМР в проточных условиях



Позволяет осуществлять эксперименты с вращением образца под “магическим углом” в условиях непрерывного потока газообразных реагентов через слой адсорбента/катализатора.¹

Вакуумная установка для подготовки образцов



Позволяет осуществить обработку исследуемого образца в вакууме, либо в газовой атмосфере заданного состава, осуществить адсорбцию газообразных/жидких веществ в заданных количествах на подготовленный адсорбент (катализатор).

Объем твердого порошкообразного образца, требуемого для одного эксперимента 0.05–0.20 см³.

Приготавливаемые образцы

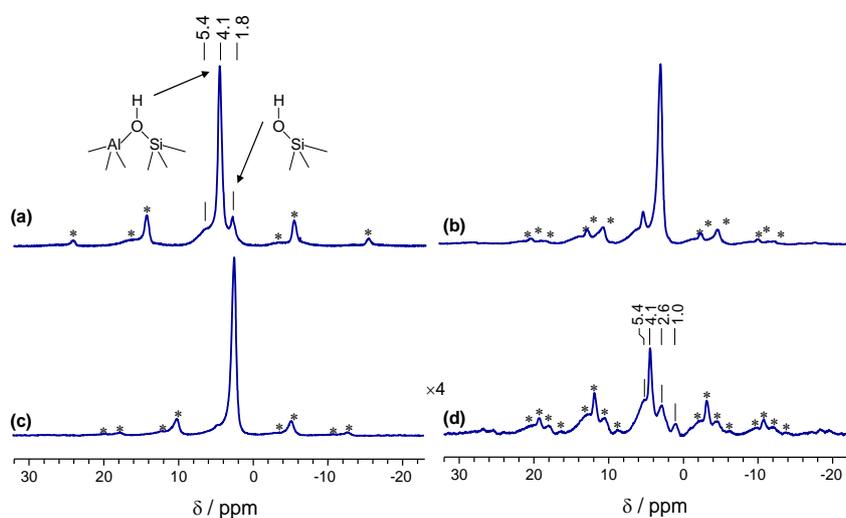


Для MAS ЯМР экспериментов в контролируемой газовой атмосфере (или вакууме) исследуемое вещество помещается в специальные аксиально-симметричные стеклянные ампулы.

Для активации таких образцов при высокой температуре и в вакууме используются специальные устройства (показано на рисунке) для подключения к вакуумной установке. После активации и возможной адсорбции на образец газов или реагентов, образец в нижней части устройства отпаивается. Получается аксиально-симметричная запаянная ампула с исследуемым образцом. Ампула плотно вставляются в 4 или 7 мм MAS ЯМР роторы. Для высокотемпературных экспериментов наряду с роторами из оксида циркония используются также крышки из оксида циркония.

ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ

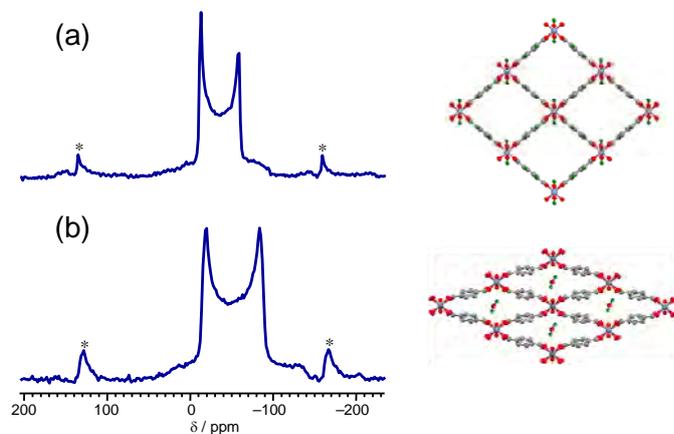
¹H MAS ЯМР характеристика поверхностных протонных центров цеолитных и оксидных катализаторов и адсорбентов



¹H MAS ЯМР спектры цеолитов H-ZSM-5 (a) и H-BEA (b-d), показывают наличие различных по кислотности OH групп на поверхности цеолита. TRAPDOR эксперимент (b-d), для цеолита H-BEA: (a) спектр без облучения и (b) с облучением образца на частоте резонанса ²⁷Al; (d) разность спектров (b) и (c) позволяет выявить сигналы OH групп связанных с алюминием и таким

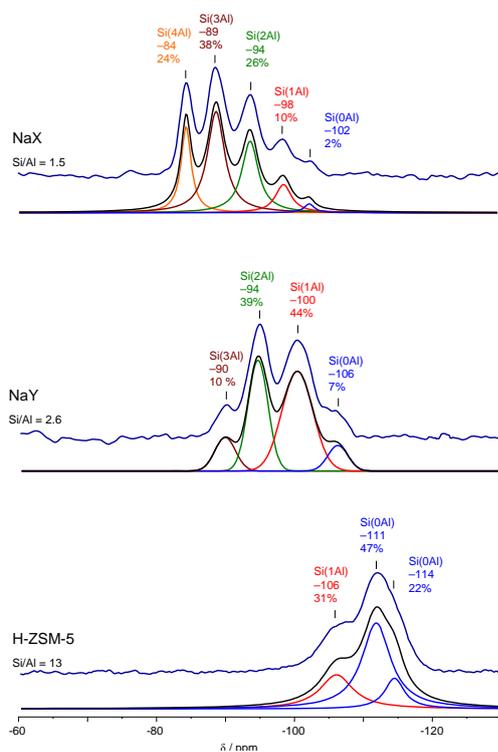
образом выявить OH группы, связанные с внекаркасным алюминием.²

Характеристика структуры цеолитных катализаторов и металл-органических каркасов с помощью ²⁷Al и ²⁹Si MAS ЯМР



²⁷Al MAS ЯМР позволяет выявлять структурный и внекаркасный алюминий в цеолитных катализаторах, а также осуществлять мониторинг изменения структуры металл-органических каркасов (МОК) при различных воздействиях на материал. В качестве примера приведены ²⁷Al MAS ЯМР спектры МОК MIL-53(Al) открытой (a) и закрытой (b) (с адсорбированной водой) форм каркаса, отличающиеся спектральными параметрами:

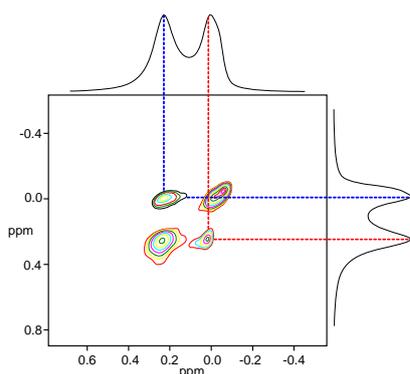
(a) $\delta = 3.3$ м.д., $C_Q = 8.36$ МГц, $\eta_Q = 0$; (b) $\delta = 3.4$ м.д., $C_Q = 10.67$ МГц, $\eta_Q = 0.15$.



Цеолиты, как высоко-кристаллические материалы, часто обладают свойствами, которые препятствуют использованию традиционных дифракционных методов для определения их структуры (микрорасположение кремния и алюминия в структуре неупорядоченно). Поэтому для характеристики структуры цеолитов часто используют ^{29}Si MAS ЯМР.

Каждый тип структурных тетраэдров $\text{Si}(n\text{Al})$ ($n=0, 1, 2, 3, 4$) дает характерный сигнал с определенным хим. сдвигом. Относительная интенсивность сигнала непосредственно связана с концентрацией различных $\text{Si}(n\text{Al})$ фрагментов. Следовательно, из анализа хим. сдвигов сигналов и их интенсивностей могут быть определены относительные доли различных $\text{Si}(n\text{Al})$ фрагментов. В частности, таким образом может быть определено отношение Si/Al в цеолитах. В качестве примера приведены спектры цеолитов NaX, NaY, ZSM-5 с определенными для них отношениями Si/Al .

Характеристика динамики молекул между газовой фазой и адсорбированным состоянием



Использование двумерной (2Д) ^1H MAS обменной ЯМР спектроскопии для характеристики динамики метана, адсорбированного в цеолит $\text{Zn}^{2+}/\text{H-ZSM-5}$, позволяет установить наличие химического обмена между адсорбированным метаном и метаном в газовой фазе с характерными скоростями $10\text{-}60\text{ с}^{-1}$ при $T=353\text{-}463\text{ К}$.³

Исследование молекулярной подвижности в микро-мезопористых материалах и твердых телах с использованием ЯМР спектроскопии на ядрах дейтерия (^2H ЯМР)

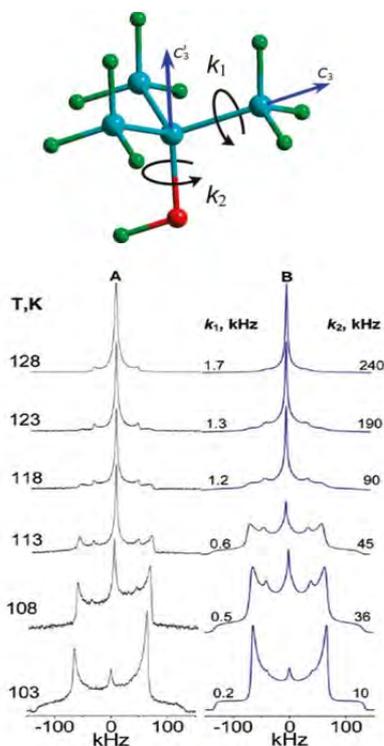
Метод ^2H ЯМР предоставляет широкие возможности для исследования молекулярной подвижности как в чистых твердых телах, так и в сложных гетерогенных системах – сорбентах, катализаторах, полимерах, а также современных функциональных материалах. Для его применения, помимо технической базы, требуется наличия специализированного программного обеспечения для расчета наблюдаемой формы линии. В нашей группе отработаны следующие экспериментальные методики:

1. ^2H ЯМР стимулированное эхо: анализ формы линии твердотельного спектра. Чувствительно к геометрии движения. Диапазон характерных времен движения: $10 - 10^{-3}$ с.
2. ^2H ЯМР твердотельное эхо: анализ формы линии твердотельного спектра. Чувствительно к геометрии движения. Диапазон характерных времен движения: $10^{-4} - 10^{-7}$ с.

3. Анизотропная и изотропная T_1 , T_2 ^2H ЯМР спиновая релаксация для жидких и твердотельных образцов. Чувствительно к геометрии движения. Диапазон характерных времен движения: $10^{-6} - 10^{-11}$ с.

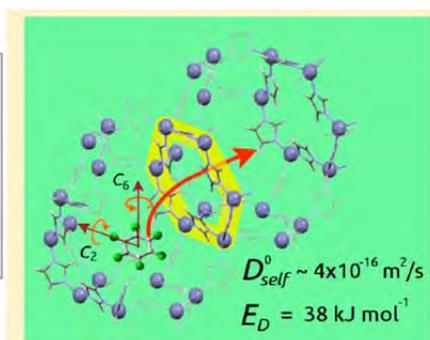
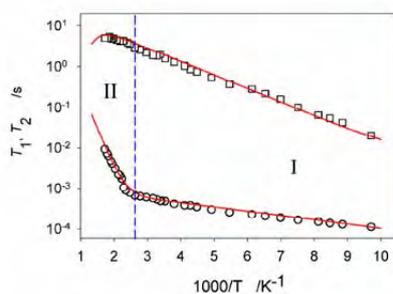
Объекты исследования:

Молекулярные кристаллы и гидраты



Анализ формы линии ^2H ЯМР спектров и анизотропной T_1 релаксации позволяют установить детальный механизм молекулярной подвижности в конденсированном состоянии: органических фрагментов в молекулярных кристаллах (твердый трет-бутиловый спирт,⁴ метил-имидазол⁵), а также кристаллогидратах на основе различных солей ($\text{CaCl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$).⁶ В качестве примера приведен анализ температурной зависимости формы линии спектра трет-бутилового спирта- d_9 , что позволило установить механизма вращения метильных групп спирта вокруг двух осей C_3 и C_3' .⁴

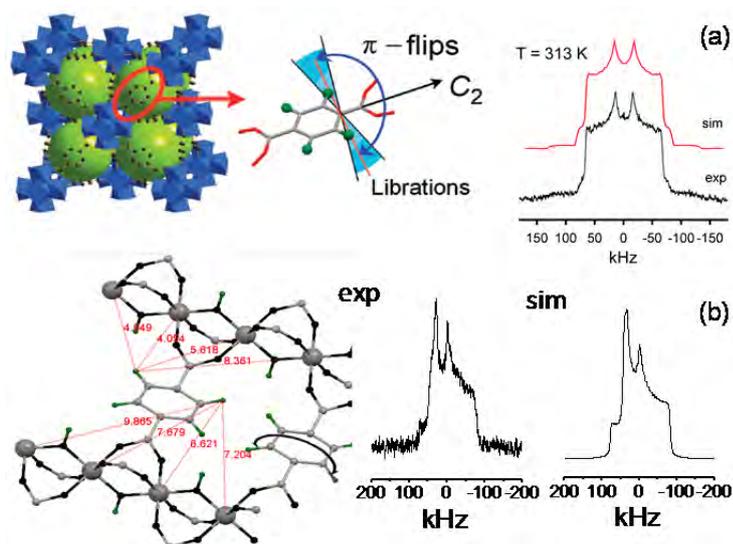
Гостевые молекулы в пористых средах: катализаторах и сорбентах



Методы ^2H ЯМР спектроскопии твердого тела также позволяют изучать особенности динамического поведения для молекул, удерживаемых в порах сорбентов и катализаторов различной природы (цеолитов и металл-органических каркасов - МОК). На основе

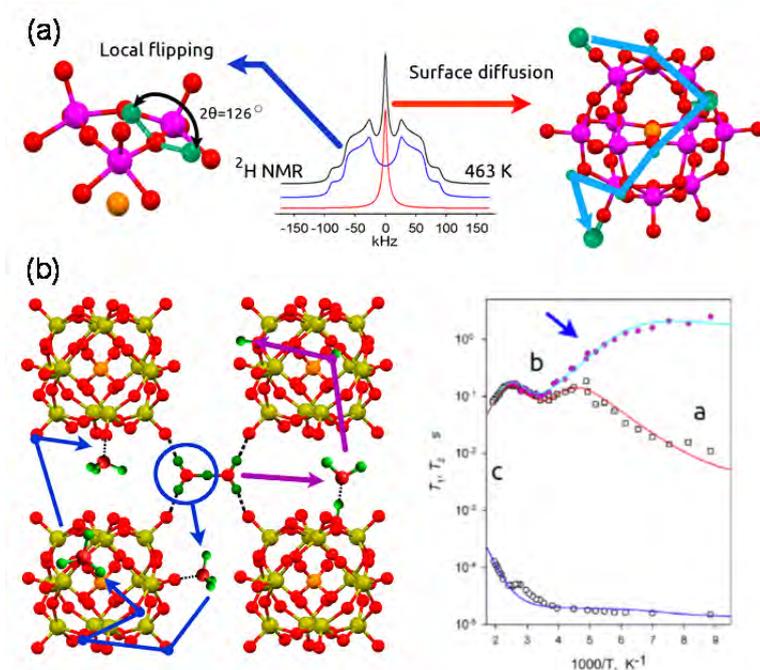
анализа температурной зависимости релаксации бензола в порах МОК ZIF-8, были установлены особенности его подвижности в порах этого МОК.⁷

Структурная подвижность в пористых металл-органических каркасах



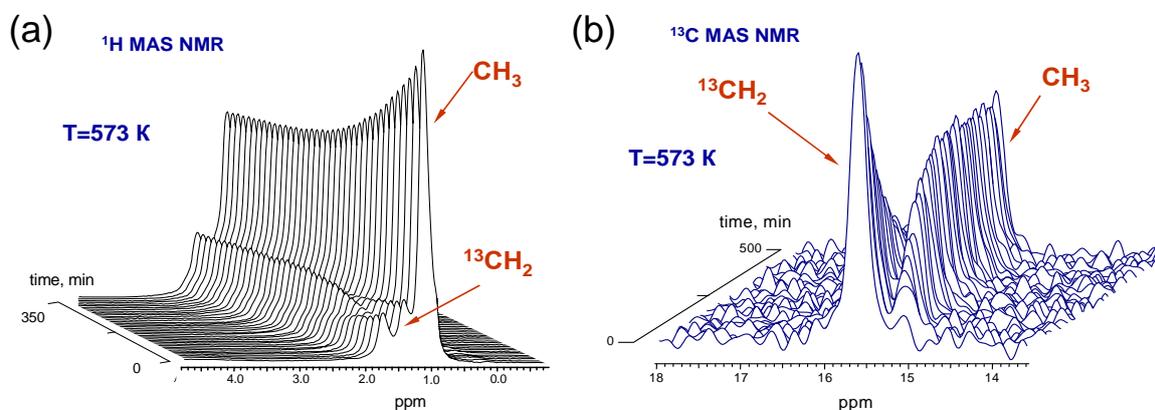
Анализ формы линии ^2H ЯМР спектра дейтерированных фрагментов МОК позволяет устанавливать механизм подвижности фрагментов как для МОК с диамагнитным катионом металла UiO-66 (Zr)⁸ (a), так и для МОК, обладающим парамагнитным центром MIL-53(Cr)⁹ (b). Динамика подвижных фрагментов металл-органических каркасах позволяет получать данные о строении материалов и механизмах взаимодействия каркаса с гостевыми молекулами.

Подвижность в протонных проводниках



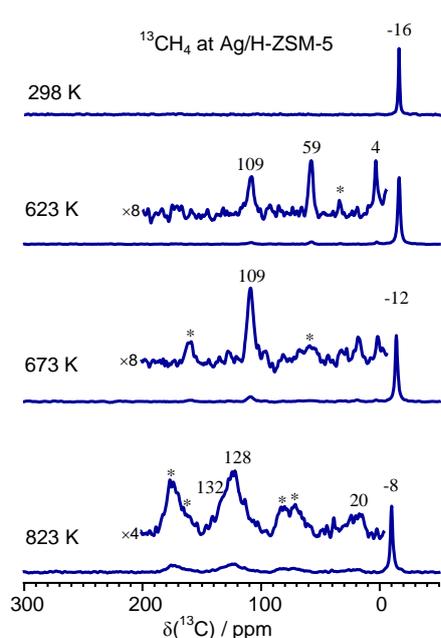
^2H ЯМР также позволяет изучать подвижность кислых протонов кислотных катализаторах и механизмы протонной проводимости в твердом теле. Приведены примеры анализа протонной подвижности в фосфор-вольфрамовой гетерополикис-лоте на основании анализа формы линии спектра¹⁰ (a) и времен релаксаций¹¹ (b).

In situ мониторинг кинетики реакции



Возможность регистрации MAS спектров образцов с адсорбированными реагентами в стеклянных запаянных ампулах, а также длительное удерживание в ЯМР датчике высокой температуры до $300\text{ }^\circ\text{C}$, позволяет анализировать кинетику химической реакции на поверхности катализатора в течение длительного промежутка времени (несколько суток).¹² В качестве примера приведен анализ кинетики переноса ^{13}C метки в пропане, адсорбированном на цеолит H-ZSM-5, из CH_2 группы пропана в его CH_3 группу. Кинетику удастся анализировать как методом ^{13}C MAS ЯМР¹³ (b), так и ^1H MAS ЯМР¹⁴ (a).

Идентификация интермедиатов



Применение метода ^{13}C MAS ЯМР в сочетании с методикой кросс-поляризации и высоко-мощным протонным подавлением (^{13}C CP/MAS NMR) позволяет производить анализ интермедиатов, образующихся на поверхности катализатора в весьма малых концентрациях. Для реакции превращения метана в бензол на поверхности цеолита $\text{Ag}^+/\text{H-ZSM-5}$, было обнаружено образование в качестве последовательных интермедиатов: метоки группы (59 м.д.), этана (4 м.д.), этилена (109 м.д.).¹⁵

- (1) Arzumanov, S. S.; Stepanov, A. G. Parahydrogen-Induced Polarization Detected with Continuous Flow Magic Angle Spinning NMR. *J. Phys. Chem. C* **2013**, *117*, 2888-2892.
- (2) Gabrienko, A. A.; Danilova, I. G.; Arzumanov, S. S.; Toktarev, A. V.; Freude, D.; Stepanov, A. G. Strong Acidity of Silanol Groups of Zeolite Beta: Evidence from the Studies by IR Spectroscopy of Adsorbed CO and ^1H MAS NMR. *Microporous Mesoporous Mater.* **2010**, *131*, 210–216.
- (3) Luzgin, M. V.; Freude, D.; Haase, J.; Stepanov, A. G. Methane Interaction with Zn^{2+} -Exchanged Zeolite H-ZSM-5: Study of Adsorption and Mobility by One- and Two-Dimensional Variable-Temperature ^1H Solid-State NMR. *J. Phys. Chem. C* **2015**, *119*, 14255–14261.
- (4) Nishchenko, A. M.; Kolokolov, D. I.; Stepanov, A. G. Mobility of Solid tert-Butyl Alcohol Studied by Deuterium NMR. *J. Phys. Chem. A* **2011**, *115*, 7428–7436.
- (5) Kolokolov, D. I.; Stepanov, A. G.; Jovic, H. Mobility of the 2-Methylimidazolate Linkers in ZIF-8 Probed by H-2 NMR: Saloon Doors for the Guests. *J. Phys. Chem. C* **2015**, *119*, 27512-27520.
- (6) Kolokolov, D. I.; Glaznev, I. S.; Aristov, Y. I.; Stepanov, A. G.; Jovic, H. Water Dynamics in Bulk and Dispersed in Silica CaCl_2 Hydrates Studied by ^2H NMR. *J. Phys. Chem. C* **2008**, *112*, 12853–12860.
- (7) Kolokolov, D. I.; Diestel, L.; Caro, J.; Freude, D.; Stepanov, A. G. Rotational and Translational Motion of Benzene in ZIF-8 Studied by ^2H NMR: Estimation of Microscopic Self-Diffusivity and Its Comparison with Macroscopic Measurements. *J. Phys. Chem. C* **2014**, *118*, 12873–12879.
- (8) Kolokolov, D. I.; Stepanov, A. G.; Guillermin, V.; Serre, C.; Frick, B.; Jovic, H. Probing the Dynamics of the Porous Zr Terephthalate UiO-66 Framework Using ^2H NMR and Neutron Scattering. *J. Phys. Chem. C* **2012**, *116*, 12131–12136.
- (9) Kolokolov, D. I.; Jovic, H.; Stepanov, A. G.; Guillermin, V.; Devic, T.; Serre, C.; Férey, G. Dynamics of Benzene Rings in MIL-53(Cr) and MIL-47(V) Frameworks Studied by ^2H NMR Spectroscopy. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2010**, *49*, 4791–4794.
- (10) Kolokolov, D. I.; Kazantsev, M. S.; Luzgin, M. V.; Jovic, H.; Stepanov, A. G. Direct ^2H NMR Observation of the Proton Mobility of the Acidic Sites of Anhydrous 12-Tungstophosphoric Acid. *ChemPhysChem* **2013**, *14*, 1783–1786.
- (11) Kolokolov, D. I.; Kazantsev, M. S.; Luzgin, M. V.; Jovic, H.; Stepanov, A. G. Characterization and Dynamics of the Different Protonic Species in Hydrated 12-Tungstophosphoric Acid Studied by ^2H NMR. *J. Phys. Chem. C* **2014**, *118*, 30023–30033.
- (12) Stepanov, A. G.; Arzumanov, S. S.; Gabrienko, A. A.; Toktarev, A. V.; Parmon, V. N.; Freude, D. Zn-Promoted Hydrogen Exchange for Methane and Ethane on Zn/H-BEA Zeolite. In situ ^1H MAS NMR Kinetic Study. *J. Catal.* **2008**, *253*, 11–21.
- (13) Arzumanov, S. S.; Reshetnikov, S. I.; Stepanov, A. G.; Parmon, V. N.; Freude, D. In situ ^1H and ^{13}C MAS NMR Kinetic Study of the Mechanism of H/D Exchange for Propane on Zeolite HZSM-5. *J. Phys. Chem. B* **2005**, *109*, 19748–19757.
- (14) Stepanov, A. G.; Arzumanov, S. S.; Ernst, H.; Freude, D. ^1H MAS NMR Monitoring of the ^{13}C -labeled Carbon Scrambling for Propane in Zeolite H-ZSM-5. *Chem. Phys. Lett.* **2006**, *420*, 574–576.
- (15) Gabrienko, A. A.; Arzumanov, S. S.; Moroz, I. B.; Toktarev, A. V.; Wang, W.; Stepanov, A. G. Methane Activation and Transformation on Ag/H-ZSM-5 Zeolite Studied with Solid-State NMR. *J. Phys. Chem. C* **2013**, *117*, 7690–7702.

Группа электронного магнитного резонанса в составе лаборатории адсорбции

Институт катализа им. Г.К. Борескова

Россия, 630090, Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, 5

<http://www.catalysis.ru>



ЗАВЕДУЮЩИЙ ЛАБОРАТОРИЕЙ

Мартьянов Олег Николаевич, д.х.н., профессор РАН, заместитель директора Института катализа по научной работе, руководитель отдела физико-химических методов исследования

Научные интересы: развитие и применение методов исследования строения и свойств каталитических систем, а также процессов с их участием, в режиме *in situ*, в том числе при повышенных температурах и давлениях; магнитные наночастицы; электронный магнитный резонанс

Тел./Факс: +7(383)3309687

Тел.: +7(383)3269687

oleg@catalysis.ru, <http://www.catalysis.ru>



СОТРУДНИКИ

Юданов Валерий Фёдорович, д.х.н., г.н.с.

Научные интересы: электронный магнитный резонанс, спиновая релаксация, магнитные наночастицы, реология дисперсных систем, электрокинетические эффекты

yudanov@catalysis.ru

Трухан Сергей Николаевич, к.ф.-м.н., н.с.

Научные интересы: электронный магнитный резонанс *in situ*, физико-химические свойства сверхкритических флюидов, магнитные свойства веществ, гетерогенный катализ, наночастицы, моделирование

trukhan@catalysis.ru

Якушкин Станислав Сергеевич, к.ф.-м.н., н.с.

Научные интересы: электронный магнитный резонанс *in situ*, ферромагнитный резонанс *in situ*, магнитные наночастицы, гетерогенный катализ, адсорбция

stas-yk@catalysis.ru

Кириллов Виктор Львович, ведущий инженер

Научные интересы: синтез и функционализация магнитных частиц, электронный магнитный резонанс дисперсных магнетиков, нанесенные гетерогенные катализаторы, аэрогели

vkirillov@catalysis.ru

Нестеров Николай Сергеевич, аспирант, м.н.с.

Научные интересы: электронный магнитный резонанс, синтез наноструктурированных материалов в сверхкритических средах, нанесенные гетерогенные катализаторы, симпатичные девушки

nesterov@catalysis.ru



ОБОРУДОВАНИЕ



Bruker EleXsys 500

Спектрометр укомплектован набором ячеек для исследования различных систем:

- **ER 4102ST** – стандартный прямоугольный CW-резонатор X-диапазона;
- **ER 4103TM** – цилиндрический резонатор для образцов с высоким диэлектрическим поглощением (водных растворов и др.);
- **ER 4104OR** – резонатор с оптическим каналом;
- **ER 4105DR** – двойной прямоугольный резонатор для количественных измерений и определения g -факторов с повышенной точностью;
- **ER 4116DM** – двухмодовый резонатор для раздельного исследования разрешенных и запрещенных переходов;
- **ER 4117MX** – резонатор со смешивающей ячейкой для изучения короткоживущих образцов и быстрых реакций;
- **ER 4122SHQE** – высокочувствительный цилиндрический резонатор;
- **ER 4114HT** – высокотемпературный резонатор для исследования образцов при температурах до 1000 °С.

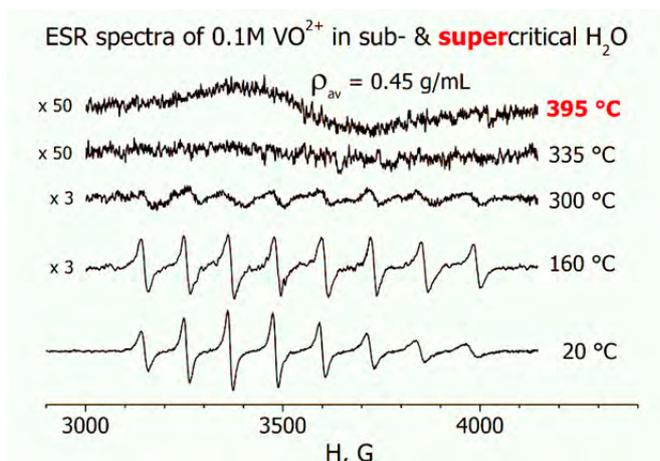
Прибор дополнительно укомплектован приставкой для регистрации спектров в Q-диапазоне (34 ГГц); температурными приставками для регистрации спектров в широком диапазоне температур (от 77 до 1273 К); дополнительными наконечниками Q-TIPS для создания магнитного поля величиной до 17 кЭ и возможностью его развертки от -17 кЭ до +17 кЭ (прохождение через нулевое поле); цифровым гониометром с возможностью автоматического управления.

ОСНОВНЫЕ НАУЧНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ

- Развитие и применение метода электронного магнитного резонанса (ЭПР/ФМР) в режиме *in situ* для исследования физико-химических процессов, протекающих при повышенных температурах и давлениях, в том числе в суб- и сверхкритических средах;
- Исследование строения и свойств каталитических систем и других функциональных материалов методами электронного магнитного резонанса, в том числе в режиме *in situ*;
- Изучение процессов формирования наноразмерных частиц и кластеров, обладающих магнитным порядком;
- Исследование межмолекулярных взаимодействий, подвижности парамагнитных частиц и динамики их локального окружения в многокомпонентных углеводородных системах методом электронного магнитного резонанса в режиме *in situ*.

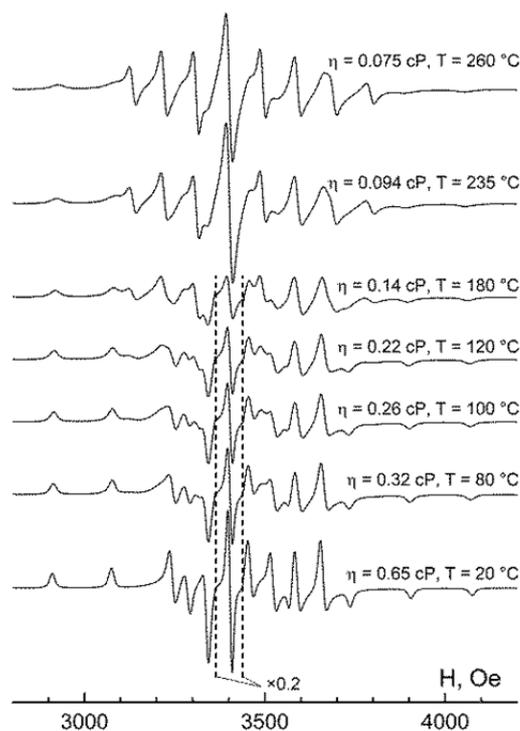
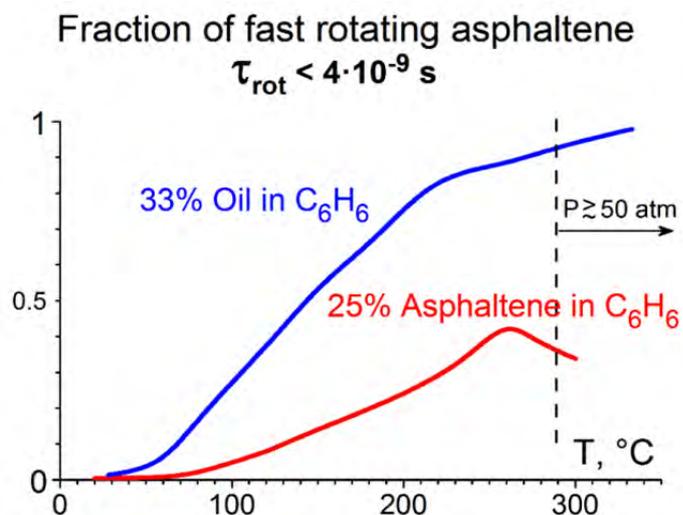
ИЗБРАННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

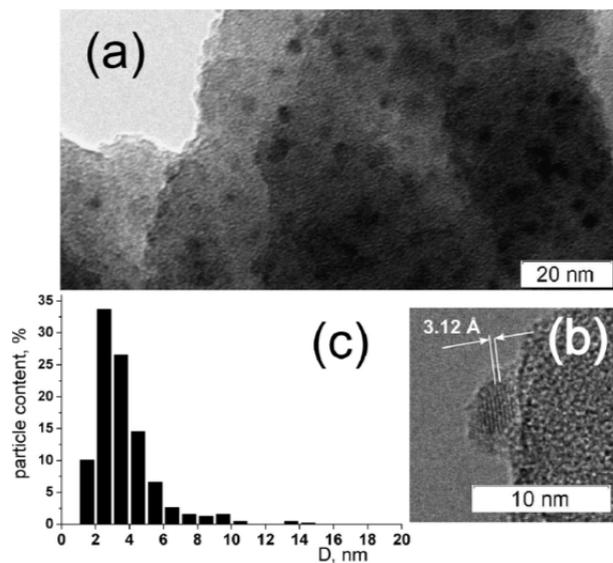
Электронный магнитный резонанс при повышенных температурах и давлениях



Развиты подходы, позволяющие использовать метод электронного магнитного резонанса *in situ* для исследования супрамолекулярных стадий образования наночастиц в суб- и сверхкритических условиях. Впервые метод ЭПР использован для экспериментального изучения физико-химических процессов в сверхкритической воде, в том числе в условиях контролируемого температурного градиента [10,14].

Экспериментально изучена подвижность асфальтенов в различных нефтях при повышенных давлениях (~50 атм.) и температурах, что позволило получить прямую информацию о механизмах потери агрегативной устойчивости тяжелых нефтей [7].

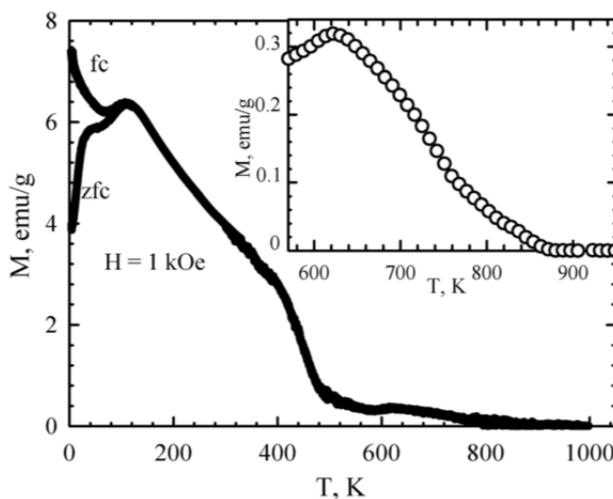
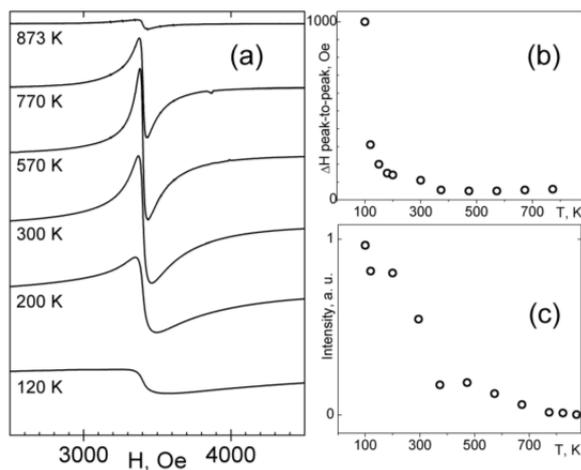




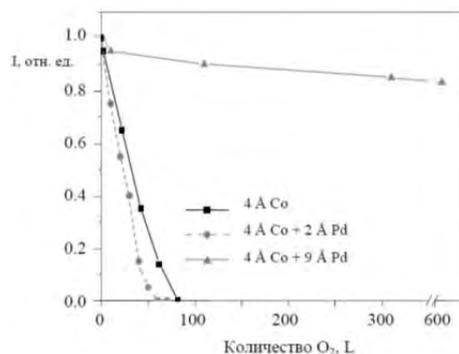
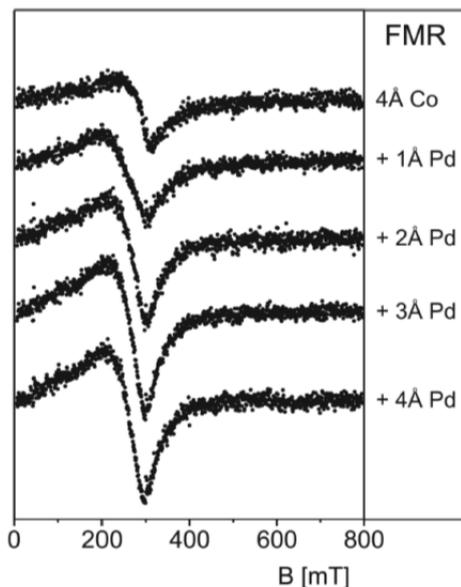
Методом ФМР в режиме *in situ* в сопоставлении с данными других методов показано, что необходимым условием формирования наночастиц $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (фаза, которая существует только в наноразмерном виде; впервые охарактеризована в 1998 г.) без примеси других полиморфов оксида железа, является пространственная стабилизация железосодержащих предшественников наночастиц [12].

Впервые синтезированы нанесенные наночастицы $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ с характерным размером несколько нанометров, узким распределением частиц по размерам и отсутствием примесей других полиморфов [16].

Исследование магнитных и магниторезонансных свойств наночастиц $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ с размерами от 3 до 9 нм в диапазоне температур от 4.2 до 1000 К позволило проанализировать роль размерных эффектов в формировании магнитных свойств наночастиц $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ [3,5,9,13].



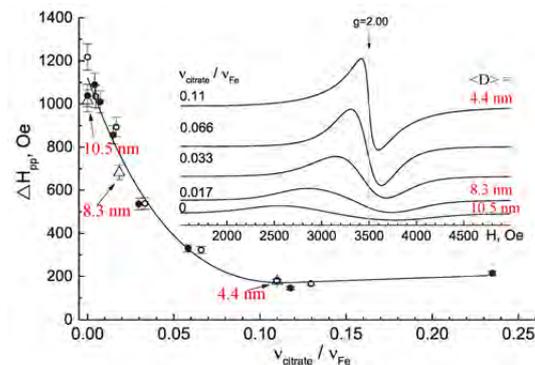
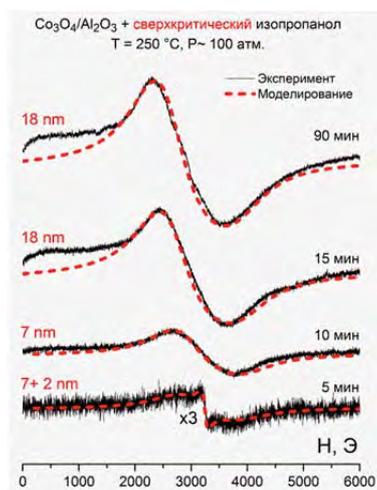
Методом ФМР *in situ* в условиях сверхвысокого вакуума при исследовании модельных нанесенных моно- и биметаллических катализаторов на основе Pd, Co, Fe, Ni (на $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(1120)$) с характерным размером частиц <10 нм показано, что Pd индуцирует существенное увеличение эффективного магнитного момента частиц, связанное со структурной перестройкой исходно нанесенных частиц. Обнаружено, что предельно малые количества нестехиометрического кислорода, которые не идентифицируются традиционными методами *surface science*, оказывают существенное влияние на химию поверхности и процессы окисления нанесенных наночастиц [20,22,26].



Изменение интегральной интенсивности спектров ФМР: нанесенных на монокристалл $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ металлических наночастиц Co; частиц Co, частично и полностью покрытых оболочкой Pd* при взаимодействии с различным количеством кислорода при 300 К.

*толщина гипотетической пленки металла, равномерно покрывающей подложку

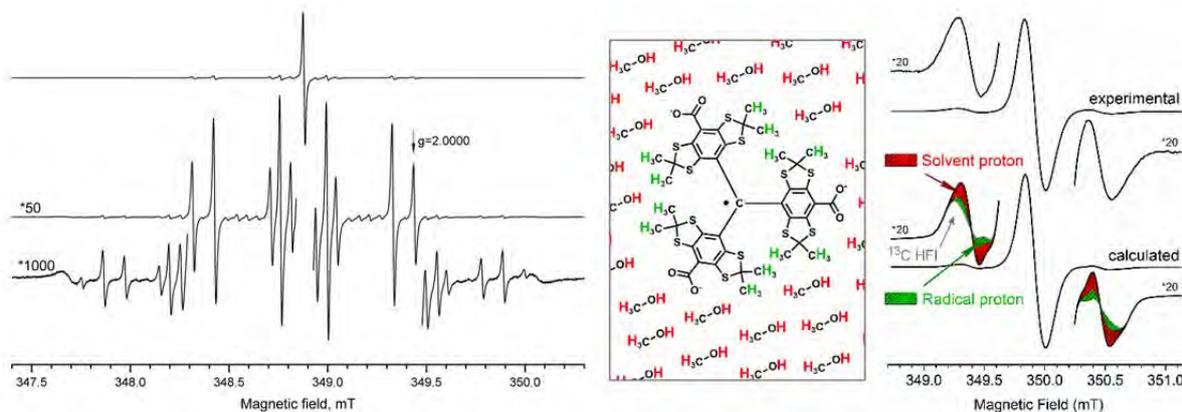
Методом ФМР *in situ* исследован рост частиц магнетита в процессе их синтеза в присутствии цитрат-ионов. Результаты позволили создать методики синтеза частиц магнетита с контролируемым размером в диапазоне от единиц до нескольких десятков нм [8].



Методом ФМР *in situ* исследован процесс восстановления Со-содержащих катализаторов Фишера-Тропша. Показано, что восстановление активной фазы в среде сверхкритического изoproпанола при определенных условиях может приводить к образованию суперпарамагнитных наночастиц Со с узким распределением частиц по размерам [2].

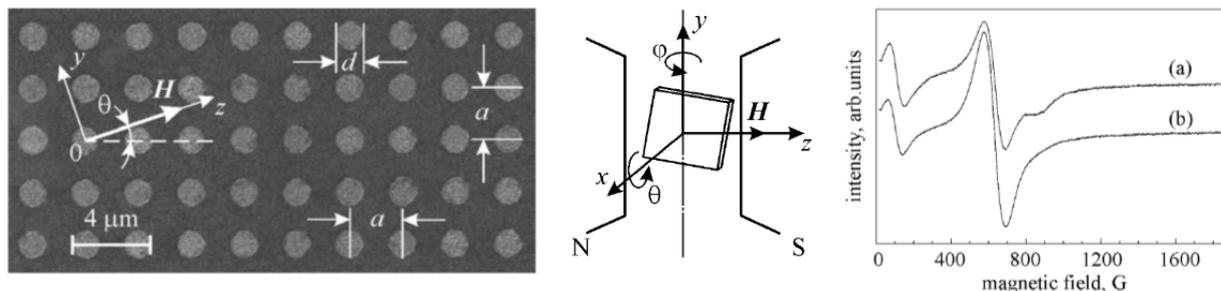
Исследование сверхтонких взаимодействий с молекулами растворителя с использованием стабильных радикалов с предельно узкой шириной линии

Регистрация и количественная интерпретация интенсивности «запрещенных» переходов, обусловленных СТВ взаимодействием неспаренного электрона с протонами растворителя [11].

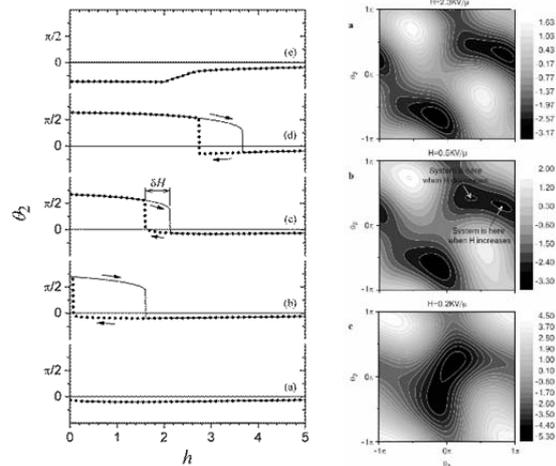
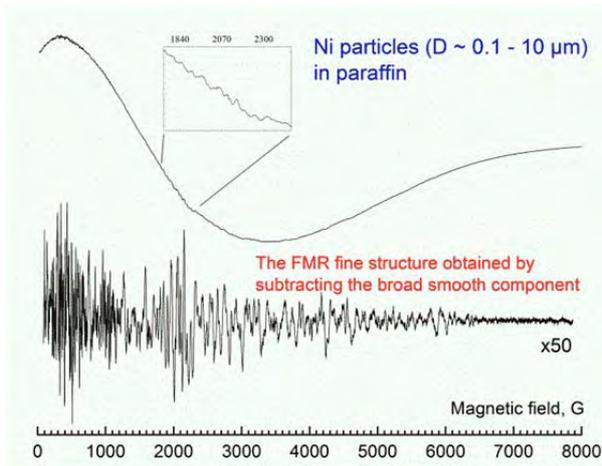


Магнитные межчастичные взаимодействия в спектроскопии ФМР

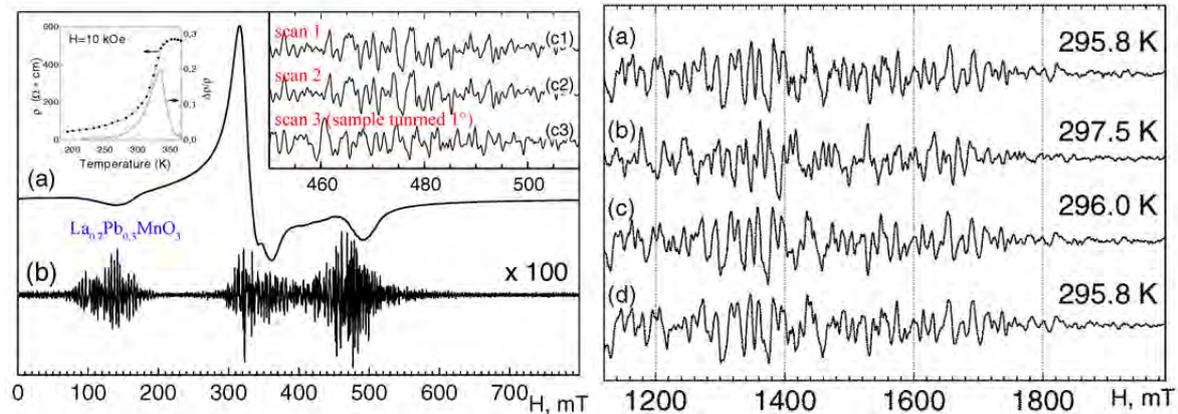
Методом ФМР исследованы коллективные эффекты в двумерных периодических структурах. Показано, что магнитные диполь-дипольные взаимодействия в дисперсных системах магнитных частиц при определенных условиях могут приводить к появлению в спектрах электронного магнитного резонанса дополнительных линий поглощения [23,27].



Обнаружен и детально исследован новый тип спектров ферромагнитного резонанса дисперсных магнетиков – тонкая структура ферромагнитного резонанса (ТС ФМР), связанный с наличием в системе магнитных диполь-дипольных взаимодействий [29, 31-36]. Экспериментально и теоретически показано, что причиной возникновения тонкой структуры является воспроизводимое ступенчатое изменение намагниченности диполь-дипольно взаимодействующих магнитных частиц [18, 21].

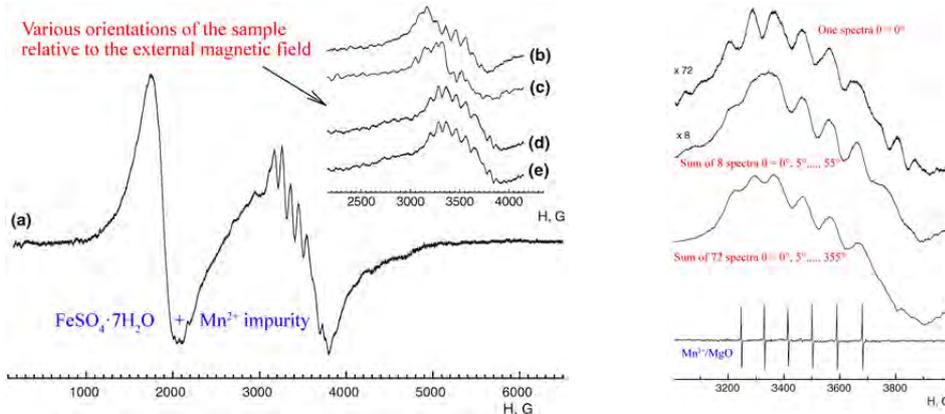


Тонкая структура ФМР спектров – уникальный инструмент исследования магнитного фазового расслоения в системах проявляющих эффект гигантского магнетосопротивления [24].



Методика идентификации парамагнитных центров в образцах, содержащих ферромагнитные частицы

Предложен простой и эффективный метод разделения парамагнитного и ферромагнитного вкладов в резонансное поглощение, наблюдаемое одновременно в спектрах электронного магнитного (спинового) резонанса систем, содержащих ферромагнитные частицы и изолированные парамагнитные центры [17].



ИЗБРАННЫЕ ПУБЛИКАЦИИ

1. Morozov E.V., Martyanov O.N. Probing flocculant-induced asphaltene precipitation via NMR imaging: From model toluene – asphaltene systems to natural crude oils. *Applied Magnetic Resonance* **47** (2016) 223.
2. Нестеров Н.С., Сименцова И.И., Юданов В.Ф., Мартъянов О.Н. Сравнительное исследование процесса восстановления Со-содержащих катализаторов процесса Фишера-Тропша в среде водорода и сверхкритического изопропанола методом ФМР. *Журнал структурной химии* **57** (2016) 112.
3. Dubrovskiy A.A., Balaev D.A., Shaykhutdinov K.A., Bayukov O.A., Pletnev O.N., Yakushkin S.S., Bukhtiyarova G.A., Martyanov O.N. Size Effects in the Magnetic Properties of ϵ -Fe₂O₃ Nanoparticles. *J. Applied Physics* **118** (2015) 213901
4. Martyanov O.N., Balaev D.A., Pylypenko O.V., Odnodvoretz L.V., Chernov S.V., Nepijko S.A., Elmers H.-J., Schneider C.M., Schonhense G. FMR Investigations of Two-dimensional Periodic Arrays of Disc-shaped Co Particles at Different Temperatures. *J. Supercond. Nov. Magn.* **28** (2015) 3587
5. Balaev D., Poperechny I., Krasikov A., Shaykhutdinov K., Dubrovskiy A., Popkov S., Balaev A., Yakushkin S., Bukhtiyarova G., Martyanov O., Raikher Yu. Dynamic magnetization of ϵ -Fe₂O₃ in pulse Field: evidence of surface effect. *J. Applied Physics* **117** (2015) 063908
6. Gabrienko A.A., Morozov E.V., Subramani V., Martyanov O.N., Kazarian S.G. Chemical visualization of asphaltene aggregation processes studied *in situ* with ATR-FTIR spectroscopic imaging and NMR imaging. *J. Phys. Chem. C* **119** (2015) 2646
7. Trukhan S.N., Yudanov V.F., Gabrienko A.A., Subramani V., Kazarian S., Martyanov O.N. *In situ* ESR study of molecular dynamics of asphaltene at elevated temperature and pressure. *Energy & Fuel* **28** (2014) 6315
8. Kirillov V.L., Balaev D.A., Semenov S.V., Shaikhutdinov K.A., Martyanov O.N. Size control in the formation of magnetite nanoparticles in the presence of citrate ions. *Materials Chemistry and Physics* **145** (2014) 75
9. Balaev D.A., Dubrovskiy A.A., Shaykhutdinov K.A., Bayukov O.A., Yakushkin S.S., Bukhtiyarova G.A., Martyanov O.N. Surface effects and magnetic ordering in few-nanometer-sized -Fe₂O₃ particles. *J. Applied Physics* **114** (2013) 163911
10. Трухан С.Н., Юданов В.Ф., Мартъянов О.Н. Эффекты кластеризации ионов VO²⁺ в суб- и сверхкритической воде. Исследование методом ЭПР *in situ*. *Сверхкритические Флюиды: Теория и Практика* **8** (2013) 57
11. Trukhan S.N., Yudanov V.F., Tormyshev V.M., Rogozhnikova O.Y., Trukhin D.V., Bowman M.K., Krzyaniak M.D., Chen H., Martyanov O.N. Hyperfine Interactions of Narrow-line Trityl Radical with Solvent Molecules. *J. Magnetic Resonance* **233** (2013) 29
12. Якушкин С.С., Бухтиярова Г.А., Мартъянов О.Н. Условия формирования магнитоупорядоченной фазы epsilon-Fe₂O₃. Исследование методом ФМР *in situ*. *Журнал структурной химии* **54** (2013) 848
13. Yakushkin S.S., Dubrovskiy A.A., Balaev D.A., Shaykhutdinov K.A., Bukhtiyarova G.A., Martyanov O.N. Magnetic properties of few nanometers epsilon-Fe₂O₃ nanoparticles supported on the silica. *J. Applied Physics* **111** (2012) 044312
14. Trukhan S.N., Yudanov V.F. & Martyanov O.N. Electron spin resonance of VO²⁺ radical-ion in sub- and supercritical water. *J. Supercritical Fluids* **57** (2011) 247
15. Morozov E.V., Martyanov O.N., Volkov N.V., Falaleev O.V. NMR Imaging of Heavy Crude Oil for Softening Detection under Heat Treatment. *J. Mater. Sci. and Engineering A* **1** (2011) 545
16. Bukhtiyarova G. A., Shuvaeva M. A., Bayukov O. A., Yakushkin S. S., Martyanov O.N. Facile synthesis of nanosized ϵ -Fe₂O₃ particles on the silica support. *J. Nanoparticle Research* **13** (2011) 5527
17. Yakushkin S.S., Trukhan S.N., Yudanov V.F., Bukhtiyarova G.A., Martyanov O.N. Features of EPR Application to Systems Containing Paramagnetic Centers and Ferromagnetic Nanoparticles. *Applied Magnetic Resonance* **38** (2010) 495
18. Martyanov O.N., Trukhan S.N. & Yudanov V.F. Ferromagnetic resonance fine structure of dispersed magnets: Physical origin and applications. *Applied Magnetic Resonance* **33** (2008) 57
19. Мартъянов О.Н., Юданов В.Ф. Образование дисперсных ферромагнитных наночастиц в цеолитах в ходе термокислородной активации. *Журнал структурной химии* **49** (2008) 439
20. Martyanov O.N., Risse T., Freund H. -J., Influence of Pd codeposition on the magnetic properties of Co particles on alumina/NiAl(110). *J. Chem. Phys.* **129** (2008) 114703
21. Трухан С.Н., Мартъянов О.Н., Юданов В.Ф. Скачкообразное намагничивание дисперсных ферромагнетиков, обусловленное магнитными межчастичными взаимодействиями. *Физика твердого тела* **50** (2008) 440
22. Felicissimo M.P., Martyanov O.N., Risse T., Freund H.-J. Characterization of a Pd-Fe bimetallic model catalyst. *Surface Science* **601** (2007) 2105

23. Martyanov O.N., Yudanov V.F., Lee R.N., Nepijko S.A., Elmers H.J., Hertel R., Schneider C.M., Schoenhense G. Ferromagnetic resonance study of thin film antidot arrays: Experiment and micromagnetic simulations. *Physical Review B* **75** (2007) 174429
24. Martyanov O., Yudanov V., Lee R., Volkov N., Sablina K. FMR fine structure - A tool to investigate the spatial magnetic phase separation phenomena in manganites. *Physica Status Solidi-Rapid Research Letters* **1** (2007) R22-R24.
25. Исупов В.П., Чупахина Л.Э., Митрофанова Р.П., Старикова Е.В., Аборнев И.С., Мартьянов О.Н., Юданов В.Ф. Высокодисперсные ферромагнитные системы на основе суперпарамагнитных частиц никеля и Li-Al слоистых гидроксидов. *Доклады Академии Наук* **413** (2007) 643
26. Nowitzki T., Carlsson A.F., Martyanov O., Naschitzki M., Zielasek V., Risse T., Schmal M., Freund H.-J., Baeumer M. Oxidation of alumina-supported Co and Co-Pd model catalysts for the Fischer-Tropsch reaction. *J. Phys. Chem. C* **111** (2007) 8566
27. Martyanov O.N., Yudanov V.F., Lee R.N., Nepijko S.A., Elmers H.J., Schneider C.M., Schonhense G. Ferromagnetic resonance investigation of collective phenomena in two-dimensional periodic arrays of Co particles. *Applied Physics A: Materials Science & Processing* **81** (2005) 679
28. Юликов М.М., Аборнев И.С., Мартьянов О.Н., Юданов В.Ф., Исупов В.П., Чупахина Л.Э., Тарасов К.А., Митрофанова Р.П. Ферромагнитный резонанс наночастиц никеля в аморфной оксидной матрице. *Кинетика и Катализ* **45** (2004) 1
29. Martyanov O.N., Lee R.N. & Yudanov V.F. Manifestation of granular structure in FMR spectra. *J. Magn. Magn. Materials* **267** (2003) 13
30. Исупов В.П., Тарасов К.А., Чупахина Л.Э., Митрофанова Р.П., Старикова Е.В., Юликов М.М., Мартьянов О.Н., Юданов В.Ф., Ермаков А.Е., Андреева О.Б. Темплатный синтез суперпарамагнитных частиц никеля при термическом разложении $[\text{LiAl}_2(\text{OH})_6]_2[\text{Niedta}]_4\text{H}_2\text{O}$. *Доклады Академии Наук* **391** (2003) 492
31. Мартьянов О.Н., Ли Р.Н., Юданов В.Ф. Тонкая структура спектров ферромагнитного резонанса дисперсных магнетиков. *Письма в ЖЭТФ* **75** (2002) 763
32. Yulikov M.M., Matryanov O.N. & Yudanov V.F. Noiselike magnetic resonance fine structure for ferromagnetic powders: Dipole-dipole interaction effects. *Applied Magnetic Resonance* **23** (2002) 105
33. Юликов М.М., Мартьянов О.Н., Юданов В.Ф. Статистический характер формирования тонкой структуры спектров ферромагнитного резонанса гамма-окиси железа. *Журнал структурной химии* **41** (2000) 1072
34. Мартьянов О.Н., Юданов В.Ф. Эффекты неполного усреднения в спектрах ЭПР полиориентированных парамагнитных центров. *Журнал структурной химии* **40** (1999) 1085
35. Мартьянов О.Н., Юданов В.Ф. Собственные шумоподобные спектры СВЧ-резонатора радиоспектрометра. *Приборы и техника эксперимента* **1** (1999) 76
36. Yudanov V.F., Martyanov O.N. & Molin Y.N. Noise-like magnetic resonance absorption in zeolites. *Chem. Phys. Letters* **284** (1998) 435

Лаборатория химии и физики свободных радикалов

Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН
630090, г. Новосибирск, ул. Институтская 3

НАУЧНЫЕ ИНТЕРЕСЫ

Использование спектроскопии стационарного и импульсного электронного парамагнитного резонанса спиновых зондов и меток для изучения структуры и динамики биологических систем, изучение свойств и реакций свободных радикалов и возбужденных состояний в химических и биологических системах, развитие спектроскопических методов для этих целей. Разработка новых методов спектроскопии электронного спинового эха, импульсного двойного электрон-электронного резонанса (ELDOR, DEER) и электрон-ядерного резонанса (ENDOR).

ОСНОВНЫЕ СОТРУДНИКИ



заведующий лабораторией
д.ф.-м.н. профессор
Сергей Андреевич Дзюба
dzuba@kinetics.nsc.ru
Тел. +7 (383) 333-12-76



советник РАН, академик
Юрий Дмитриевич Цветков
(организатор и зав. лабораторией в
1968 – 2003 гг.)
tsvetkov@kinetics.nsc.ru
Тел. +7 (383) 333-21-92



к.ф.-м.н.
Римма Ивановна Самойлова
samoilov@kinetics.nsc.ru
Тел. +7 (383) 333-22-97



к.ф.-м.н.
Александр Георгиевич Марьясов
maryasov@kinetics.nsc.ru
Тел. +7 (383) 333-13-77



к.х.н.
Ирина Алексеевна Слепнева
slepneva@kinetics.nsc.ru
Тел. +7 (383) 333-22-94

к.ф.-м.н.
Юрий Иванович Глазачев
glaza@kinetics.nsc.ru
Тел. +7 (383) 333-22-94



к.ф.-м.н.
Николай Павлович Исаев
isaev@kinetics.nsc.ru
Тел. +7 (383) 333-30-48



к.х.н.
Анна Геннадьевна Матвеева
anna.matveeva86@gmail.com
Тел. +7 (383) 333-22-94

Группа Органической фотовольтаики

НАУЧНЫЕ ИНТЕРЕСЫ

Фотовозбуждение, перенос энергии и заряда в композитах проводящих полимеров и фуллеренов и фотовольтаических ячейках на их основе, исследование этих систем магнитно-резонансными, оптическими и фотоэлектрическими методами, синтез и характеристика новых материалов для органической электроники.

ОСНОВНЫЕ СОТРУДНИКИ



д.ф.-м.н., профессор РАН
Леонид Викторович Кулик
chemphy@kinetics.nsc.ru
Тел. +7 (383) 333-22-97



к.ф.-м.н.
Михаил Николаевич Уваров
uvarov@kinetics.nsc.ru
Тел. +7 (383) 333-22-97

СОТРУДНИЧЕСТВО

- Институт физико-химической биологии им. Белозерского МГУ, г. Москва
- Казанский физико-технический университет РАН
- Лейденский Университет, Нидерланды
- Университет Падуи, Италия
- Институт Химического Преобразования Энергии общества Макса Планка, Мюльхайм-на Руре, Германия (MPI for Chemical Energy Conversion, Mueheim an der Ruhr)
- Университет Алабамы, США

ОБОРУДОВАНИЕ



Спектрометр ЭПР и электронного спинового эха в X-диапазоне Eleksys E580 (Bruker, Германия) с температурными приставками ER4111VT, CF 935 (Oxford Instruments, температурный диапазон 4.2 – 310 K), с возможностью наблюдения двойного электрон-электронного резонанса и двойного электрон-ядерного резонанса.

Возможности импульсного фотовозбуждения Nd:YAG лазером с $\lambda = 266, 355, 532$ и 1064 нм; стационарного облучения ксеноновой или галогеновой лампой.



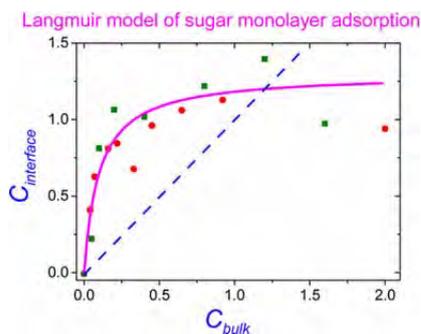
Спектрометр ЭПР и электронного спинового эха в X-диапазоне ESP 380 FT (Bruker, Германия) с температурными приставками ER4111VT, CF 935 (Oxford Instruments, температурный диапазон 4.2 – 310 K) и самодельной приставкой для импульсного переключения магнитного поля.

Возможности импульсного фотовозбуждения Nd:YAG лазером с $\lambda = 266, 355, 532$ и 1064 нм; стационарного облучения ксеноновой или галогеновой лампой.



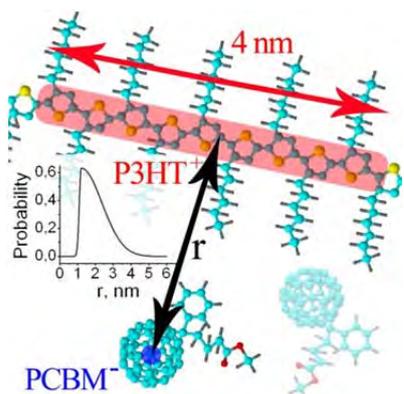
Спектрометр стационарного ЭПР в X-диапазоне типа ER-200 D-SRC (Bruker, Германия).

ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ



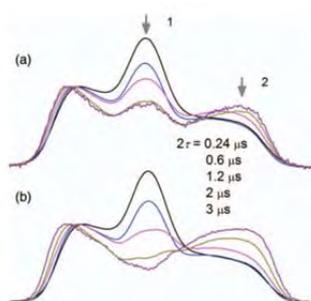
Показано, что концентрация молекул сахарозы и трегалозы, являющихся криопротекторами, вблизи поверхности мембраны подчиняется изотерме адсорбции Ленгмюра, что соответствует гипотезе замещения, т.е. молекулы сахаров непосредственно взаимодействуют с мембраной.

J. Phys. Chem. B (2015) 119, 10261–10266



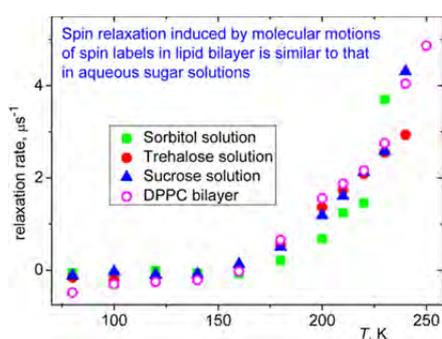
Впервые был измерен сигнал ЭСЭ вне фазы для композита проводящего полимера РЗНТ и фуллерен-производной РСВМ (один из наиболее часто используемых в органической фотовольтаике в качестве активной среды композитов) и определено среднее расстояние 2–3 нм между радикалами РЗНТ⁺ и РСВМ⁻, образующими состояние с переносом заряда.

J. Phys. Chem. B (2015) 119, 13543–1354



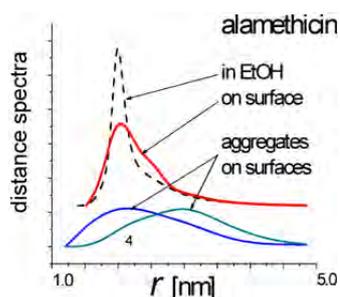
Методом электронного спинового эха показано, что спин-меченый аналог холестерина в модельных липидных мембранах не агрегируется, но существует дальнедействующее взаимодействие молекул холестерина в мембране.

J. Chem. Phys. (2014) 141(21), 211101–4



Показано, что молекулярные механизмы стабилизирующего действия сахаров в биосистемах могут быть обусловлены тем, что сахара способствуют приобретению межклеточной жидкостью на молекулярном уровне таких же свойств фазового состояния, какими обладают сложные биосистемы.

J. Phys. Chem. B (2014) 118, 12478–12485



Методом PELDOR получены функции распределения по расстояниям для спин-меченного пептида-антибиотика аламетицина на поверхности и в растворе этанола.

J. Phys. Chem. B (2014) 118, 7085–7090

ПУБЛИКАЦИИ 2014-2015 ГОДОВ

1. Kardash M.E., Dzuba S.A. Communication: Orientational Self-Ordering of Spin-Labeled Cholesterol Analogs in Lipid Bilayers in Diluted Conditions // *J. Chem. Phys.* T.141 (21). C.211101-211104. 2014.
2. Konov K.B., Leonov D.V., Isaev N.P., Fedotov K.Yu., Voronkova V.K., Dzuba S.A. Membrane-Sugar Interactions Probed by Pulsed Electron Paramagnetic Resonance of Spin Labels // *J. Phys. Chem. B.* T.119 (32). C.10261-10266. 2015.
3. Kardash M.E., Isaev N.P., Dzuba S.A. Heterogeneities in Cholesterol-Containing Model Membranes Observed by Pulsed EPR of Spin Labels // *J. Phys. Chem. B.* T.119. C.13675-13679. 2015.
4. Syryamina V.N., Maryasov A.G., Bowman M.K., Dzuba S.A. Electron Spin Echo Envelope Modulation of Molecular Motions of Deuterium Nuclei. // *J. Magn. Reson.*, DOI: 10.1016/j.jmr.2015.10.005. 2015.
5. Baranov D.S., Popov A.G., Uvarov M.N., Kazantsev M.S., Mostovich E.A., Glebov E.M., Kulik L.V. Naphtho[4,3,2,1-lmn][2,9]phenanthrolines: Synthesis, characterization, optical properties and light-induced electron transfer in composites with the semiconducting polymer MEH-PPV // *Synthetic Metal.* T.201. C.43-48. 2015.
6. Vasilevsky S.F., Baranov D.S., Mamatyuk V.I., Fadeev D.S., Gatilov Yu.V., Stepanov A.A., Vasilieva N.V., Alabugin I.V. Conformational Flexibility of Fused Tetracenedione Propellers Obtained from One-Pot Reductive Dimerization of Acetylenic Quinones // *J. Org. Chem.* T. 80. C.1618-1631. 2015.
7. Vorontsova Y.L., Slepneva I.A., Yurlova N.I., Glupov V.V. Do snails *Lymnaea stagnalis* have phenoloxidase activity in hemolymph? // *Invertebrate Survival Journal.* T.12. C.5-12. 2015.
8. Kryukova N.A., Chertkova E.A., Semenova A.D., Glazachev Yu.I., Slepneva I.A., Glupov V.V. Venom from the ectoparasitic wasp *Habrobracon hebetor* activates the calcium-dependent degradation of the haemocytes in *Galleria mellonella* larvae haemolymph // *Arch Insect Biochem Physiol.* T.90. C.117-130. 2015.
9. Sanzhaeva U., Vorontsova Y., Glazachev Yu., Slepneva I. Dual effect of nitric oxide on phenoloxidase-mediated melanization // *J. Enz. Inh. Med. Chem.*. DOI:10.3109/14756366.2015.1088843. 2015.
10. Lukina E.A., Popov A.A., Uvarov M.N., Kulik L.V. Out-of-Phase Electron Spin Echo Studies of Light-Induced Charge-Transfer States in P3HT/PCBM Composite // *J. Phys. Chem. B.* T.119. C.13543-13548. 2015.
11. Zinovieva A., Stepina N., Dvurechenskii A., Kulik L., Mussler G., Moers J., Grützmacher D., Simultaneous Localization of Electrons in different Δ -valleys in Ge/Si Quantum Dot Structures // *Solid State Phenomena.* T.233-234, C.415-418. 2015.
12. Zinovieva A.F., Smagina Z.V., Nenashev A.V., Kulik L.V., Dvurechenskii A.V. Unusual narrowing of the ESR line width in ordered structures with linear chains of Ge/Si quantum dots // *JETP Letters.* T.102. C.108-112. 2015.
13. Lukina E.A., Pozdnyakov I.P., Mereshchenko A.S., Uvarov M.N., Kulik L.V. Photochemistry of P3HT and PC60BM in Toluene Solution: Evidence of T-T Energy Transfer // *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.* T. 311. C.193-198. 2015.
14. Yi S.M., Taguchi A.T., Samoiloa R.I., O'Malley P.J., Gennis R.B., Dikanov S.A. Plasticity in the High Affinity Menaquinone Binding Site of the Cytochrome aa_3 -600 Menaquinol Oxidase from *Bacillus subtilis* // *Biochem.* T.54. C.5030-5044. 2015.
15. Milov A.D., Tsvetkov Yu.D., Raap J., De Zotti M., Formaggio F., Toniolo C. Conformation, Self-aggregation, and Membrane Interaction of Peptaibols as Studied by Pulsed Electron Double Resonance (PELDOR) Spectroscopy // *Biopolym.* 2015. DOI: 10.1002/bip.22713.
16. Milov A.D., Samoiloa R.I., Tsvetkov Yu.D., Peggion C., Formaggio F., Toniolo C. Peptides on the surface. PELDOR data for spin-labeled alamethicin F50/5 analogues on organic sorbents // *J. Phys. Chem. B* 118 7085-7090 (2014).
17. Zinovieva A.F., Stepina N.P., Nikiforov A.I., Nenashev A.V., Dvurechenskii A.V., Kulik L.V., Carmo M.C., Sobolev N.A. Spin relaxation in inhomogeneous quantum dot arrays studied by electron spin resonance // *Phys. Rev. B* 89 045305-1 - 045305-8 (2014).
18. Lukina E.A., Uvarov M.N., Kulik L.V. Charge recombination in P3HT/PC70BM composite studied by light-Induced EPR // *J. Phys. Chem. C* 118 18307-18314 (2014).
19. Baranov D.S., Popov A.G., Uvarov M.N., Kulik L.V. Synthesis of benzo[de]isoquino[1,8-gh]quinolines and light-induced electron transfer in their composites with conductive polymer poly(3-hexylthiophene) // *Mendeleev Commun.* 24 383-385 (2014).
20. Surovtsev N.V., Dzuba S.A. Flexibility of phospholipids with saturated and unsaturated chains studied by Raman scattering: the effect of cholesterol on dynamical and phase transitions // *J. Chem. Phys.* 140 235103 (2014).
21. Konov K.B., Isaev N.P., Dzuba S.A. Low-temperature molecular motions in phospholipid bilayers in presence of glycerol as studied by spin-echo EPR of spin labels // *Appl. Magn. Reson.* 45 1117-1126 (2014).
22. Konov K.B., Isaev N.P., Dzuba S.A. Low-temperature molecular motions in lipid bilayers in the presence of sugars: insights into cryoprotective mechanisms // *J. Phys. Chem. B* 118 12478-12485 (2014).
23. Hong S.J., de Almeida W.B., Taguchi A.T., Samoiloa R.I., Gennis R.B., O'Malley P.J., Dikanov S.A., Crofts A.R. The semiquinone at the Q(i) site of the bc(1) complex explored using HYSCORE spectroscopy and specific isotopic labeling of ubiquinone in *rhodobacter sphaeroides* via C-13 methionine and construction of a methionine auxotroph // *Biochemistry* 53 6022-6031 (2014).
24. Samoiloa R.I., Taguchi A.T., O'Malley P.J., Dikanov S.A., Lugtenburg J. Hyperfine interaction tensors of C-13 nuclei for ring carbons of ubisemiquinone-10 hydrogen bonded in alcohol solvents // *Applied Magnetic Resonance* 45 941-953 (2014).
25. Semenova A.D., Glazachev Yu.I., Slepneva I.A., Glupov V.V. Quantitative determination of nitric oxide production in haemocytes: Nitrite reduction activity as a potential pathway of NO formation in haemolymph of *Galleria mellonella* larvae // *Nitric oxide* 37 46-52 (2014).
26. Tolstikov S., Tretyakov E., Fokin S., Suturina E., Romanenko G., Bogomyakov A., Stass D., Maryasov A., Fedin M., Gritsan N., Ovcharenko V. C(sp²)-coupled nitronyl nitroxide and iminonitroxide diradicals // *Chem. Eur. J.* 20 2793-2803 (2014).
27. Uvarov M. N., Popov A. G., Lukina E. A., Kulik L. V. Spin relaxation and structure of light-induced spin-correlated PCBM⁻/P3HT⁺ radical pairs // *J. Struct. Chem.* 55, 644-650 (2014).

Лаборатория быстропротекающих процессов

Института химической кинетики и горения

им. В.В. Воеводского, СО РАН, г. Новосибирск



НАШ АДРЕС

ИХКГ СО РАН, Институтская, д. 3, Новосибирск, 630090

Лаборатория БПП развивает экспериментальные методы косвенного детектирования электронного парамагнитного резонанса (оптически детектируемый электронный парамагнитный резонанс – ОД ЭПР – и его времяразрешенный аналог), а также методы получения информации о спиновых взаимодействиях в парамагнитных частицах и их кинетических параметрах без применения резонансного электромагнитного поля (магнитные и электрические эффекты в рекомбинационной люминесценции, в том числе времяразрешенные, спектроскопия пересечения уровней, анализ выхода продуктов реакции в поле). В лаборатории создается уникальная экспериментальная техника для рентгеновской и оптической генерации парамагнитных состояний, разрабатываются ускорительные и СВЧ устройства, системы детектирования магниточувствительной люминесценции со спектральным и временным разрешением, позволяющие генерировать и исследовать парамагнитные состояния в широком круге систем от живых биолюминесцирующих организмов до радиационно-генерируемых ион-радикалов и фотогенерируемых триплетных состояний в кристаллах.

ОБЪЕКТЫ И НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ

- короткоживущие ион-радикальные интермедиаты в органической среде в растворах и пленках;
- спин-зависимые реакции, в том числе реакции биологически важных радикалов;
- молекулярные системы транспорта заряда и эмиссии для систем органической оптоэлектроники;
- NV^- -центры в алмазах.

КЛЮЧЕВЫЕ СОТРУДНИКИ



Зав. лабораторией, д.ф.-м.н.
Виктор Андреевич Багрянский

*ОД ЭПР, теоретическая
спиновая химия.*



Академик РАН
Юрий Николаевич Молин

*Один из основоположников спиновой
химии.*



д.ф.-м.н.
Всеволод Игоревич Боровков

*Применение метода
времяразрешенного магнитного
эффекта в рекомбинационной
флуоресценции.*



д.х.н.
Олег Александрович Анисимов

*Создатель метода ОД ЭПР при
рентгеновской и ВУФ генерации ион-
радикалов.*



к.ф.-м.н.
Сергей Владимирович Анищик

*Магнитные эффекты,
спектроскопия пересечения
уровней.*



к.ф.-м.н.
Владимир Николаевич Верховлюк

*ОД ЭПР, теоретическая спиновая
химия.*



к.ф.-м.н.
Дмитрий Владимирович Стась

*Магнитные эффекты,
спектроскопия пересечения
уровней.*

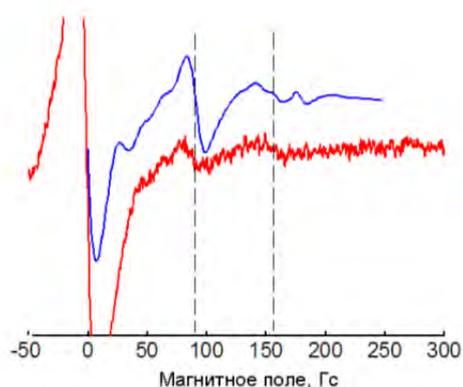
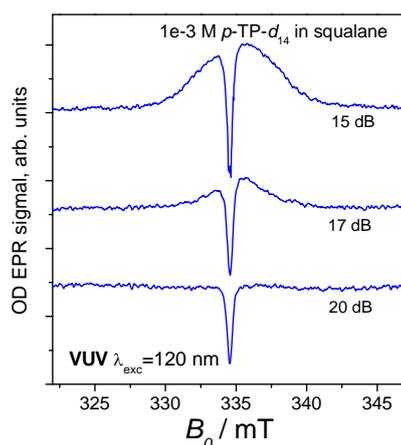
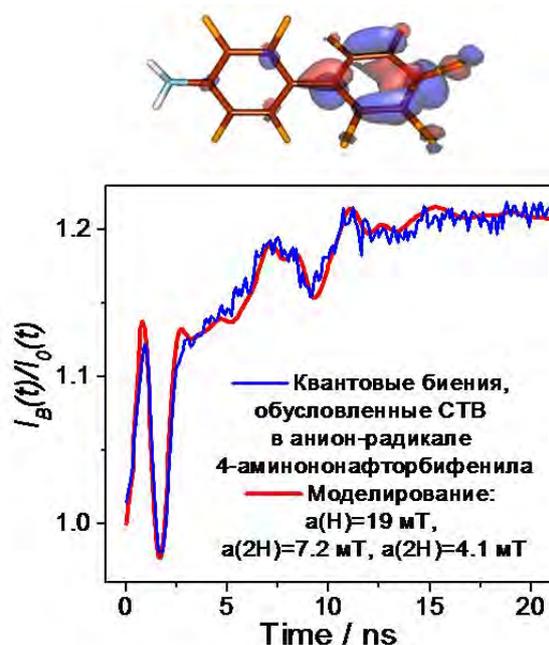


к.т.н.
Юрий Дмитриевич Черноусов

*СВЧ-техника, ускорители
электронов.*

Контакты: borovkov@kinetics.nsc.ru, stass@kinetics.nsc.ru

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ПУБЛИКАЦИИ



На примере анион-радикала (АР) пентафторанилина показано, что метод времяразрешенного магнитного эффекта позволяет наблюдать и идентифицировать АР с большими константами СТВ в условиях, когда время жизни радикала в растворе составляет всего несколько наносекунд.

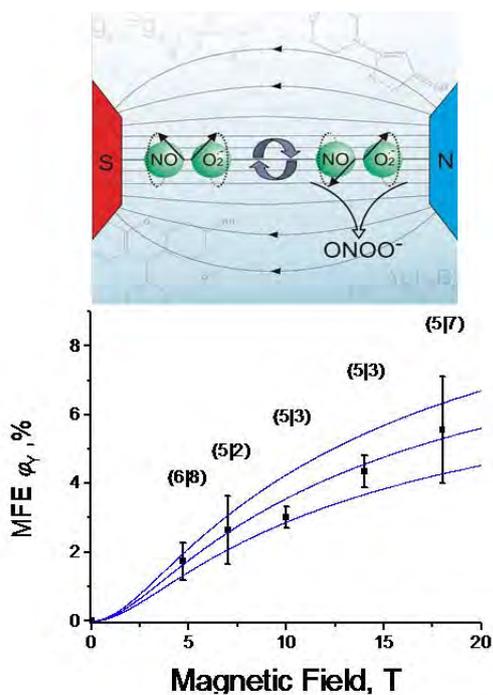
V. I. Borovkov, I. V. Beregovaya, L. N. Shchegoleva et al. Structure and Stability of Pentafluoroaniline and 4-Aminononafluorobiphenyl Radical Anions: Optically Detected Electron Paramagnetic Resonance, Time-Resolved Fluorescence, Time-Resolved Magnetic Field Effect, and Quantum Chemical Study // J. Phys. Chem. A 2015, 119, 8443–8451.

ОД ЭПР с ВУФ-генерацией пар позволяет исследовать спиново-зависимые процессы рекомбинации зарядов в тонких полимерных пленках, а также в приповерхностных слоях растворов толщиной 10–30 нм.

Anisimov O.A., Verkhovlyuk V.N., Zikirin S.B., Matveeva A.G., Trashkeev S.I., Molin Yu.N. New Possibilities of OD ESR: Vacuum Ultraviolet Generation of Radical Ion Pairs // Appl. Magn. Reson., 2014, V 45, 881 - 892.

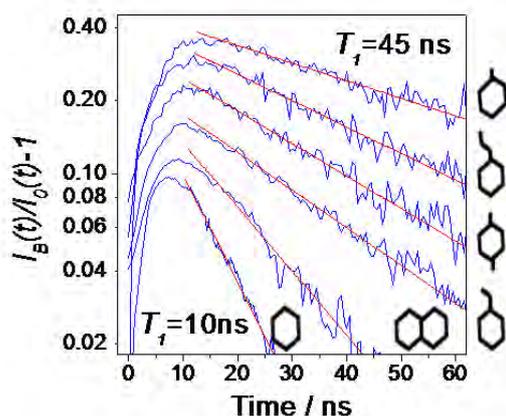
При простой сверхтонкой структуре рекомбинирующих ион-радикалов на кривой магнитного эффекта появляются характерные линии в точках пересечения уровней энергии радикальной пары, несущие ту же информацию, что и спектры ЭПР, но не требующие резонансной СВЧ накачки.

E.V. Kalneus, A.A. Kipriyanov, Jr., P.A. Purtov, D.V. Stass, Yu.N. Molin. Specific MARY Spectrum from Radical Anion of Pentafluorobenzene // Appl. Magn. Reson., 2006, V. 30, № 3–4, 549.



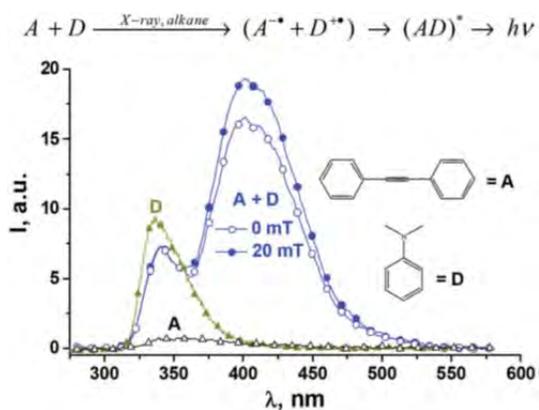
Для изучения магниточувствительности биологических процессов с участием радикалов исследован магнитный эффект в реакции рекомбинации химически генерируемых оксида азота NO и супероксид-аниона $O_2^{\cdot-}$ с образованием пероксинитрита $ONOO^-$. Увеличение выхода пероксинитрита при рекомбинации NO и $O_2^{\cdot-}$ под действием магнитного поля говорит об ускорении рекомбинации биологически важных радикалов в растворах даже при пикосекундных временах парамагнитной релаксации в радикалах.

T.Y. Karogodina, I.G. Dranov, S.V. Sergeeva, D.V. Stass, U.E. Steiner. Kinetic magnetic-field effect involving the small biologically relevant inorganic radicals NO and $O_2^{\cdot-}$. // Chemphyschem, 2011, V. 12 №9, 1714.



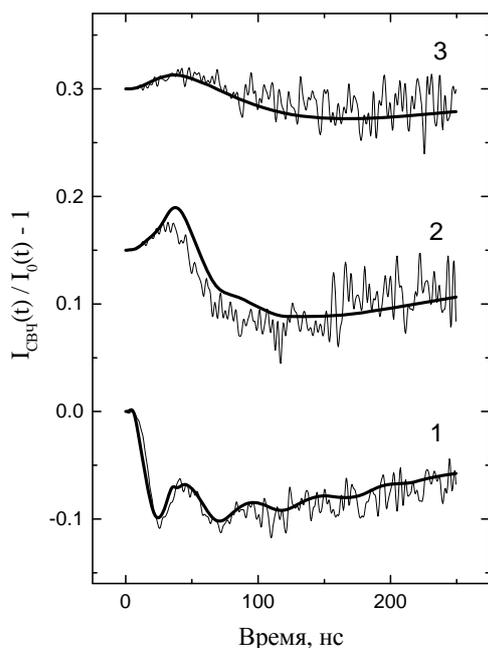
На примере катион-радикалов циклоалканов методом времязрешенного магнитного эффекта исследовано и объяснено явление anomalно быстрой парамагнитной релаксации, встречающейся в высокосимметричных системах с открытой оболочкой.

V. I. Borovkov, I. V. Beregovaya, L. N. Shchegoleva et al. Radical ions with nearly degenerate ground state: Correlation between the rate of spin-lattice relaxation and the structure of adiabatic potential energy surface. // J. Chem. Phys., 2012, V.137, №10, 104305.



Показано, что радиационная генерация ион-радикалов и их последующая рекомбинация позволяют получать эксиплексы из систем с произвольно коротким временем жизни возбужденного состояния.

A.R. Melnikov, E.V. Kalneus, V.V. Korolev, I.G. Dranov, A.I. Kruppa D.V. Stass. Highly efficient exciplex formation via radical ion pair recombination in X-irradiated alkane solutions for luminophores with short fluorescence lifetimes // Photochem. Photobiol. Sci., 2014, V. 13 №8, 1169.



Наблюдение рекомбинационной флуоресценции в условиях мощной СВЧ-накачки позволяет наблюдать за эволюцией спинового состояния ансамбля спин-коррелированных пар в наносекундном диапазоне времен и позволяет судить о парамагнитных характеристиках ион-радикалов и реакциях с их участием.

На рисунке слева: эффекты резонансной СВЧ-накачки (2450 МГц) в рекомбинационной флуоресценции растворов 1,2-дифенилиндола в гексане при различной концентрации дифенилиндола: (1) 1 мМ, (2) 10 мМ, (3) 70 мМ.

*Анищик С.В., Верховлюк В.Н., Молин Ю.Н.,
Времяразрешенные эффекты микроволно-вого поля в
рекомбинационной флуоресценции гексановых
растворов 1,2-дифенил-индола // Вестник НГУ. Серия:
Физика 2(4) 75-82 (2007).*

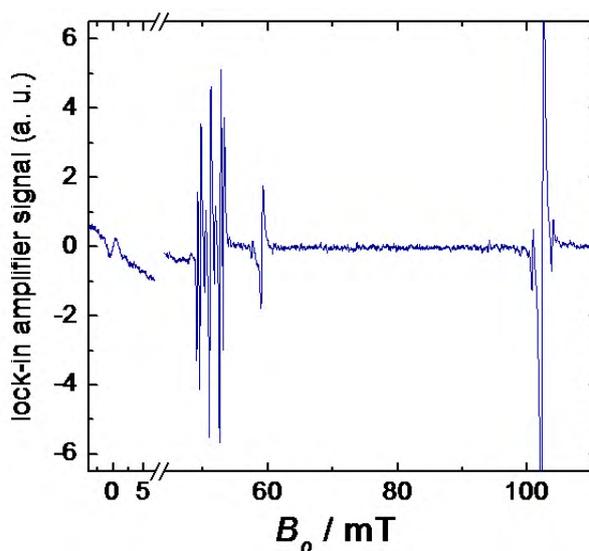
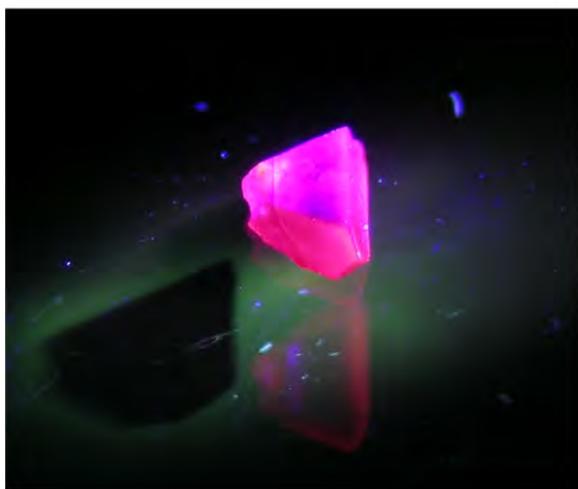


Фото слева: люминесценция NV^- -центров в алмазах при оптическом возбуждении с $\lambda = 532$ нм. Справа: спектры пересечения уровней при развертке магнитного поля без СВЧ-накачки позволяют исследовать взаимодействия NV^- -центров с другими парамагнитными центрами в алмазе.

S.V. Anishchik, V.G. Vins, A.P. Yelisseyev, N.N. Lukzen, N.L. Lavrik, V.A. Bagryansky. Low-field feature in the magnetic spectra of NV^- centers in diamond // New J. Phys. 17 (2015) 023040.

Лаборатория химической радиоспектроскопии



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии
Дальневосточного отделения Российской академии наук

О ЛАБОРАТОРИИ

Лаборатория химической радиоспектроскопии ИХ ДВО РАН специализируется на углубленном изучении микроскопического строения, фазовых переходов и ионной подвижности в неорганических фторсодержащих координационных соединениях, твердых растворах и фторидных стеклах, поиском на основе этих исследований представителей класса неорганических кристаллических и стеклообразных соединений для создания новых функциональных материалов.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ (2014 – 2015 гг.)

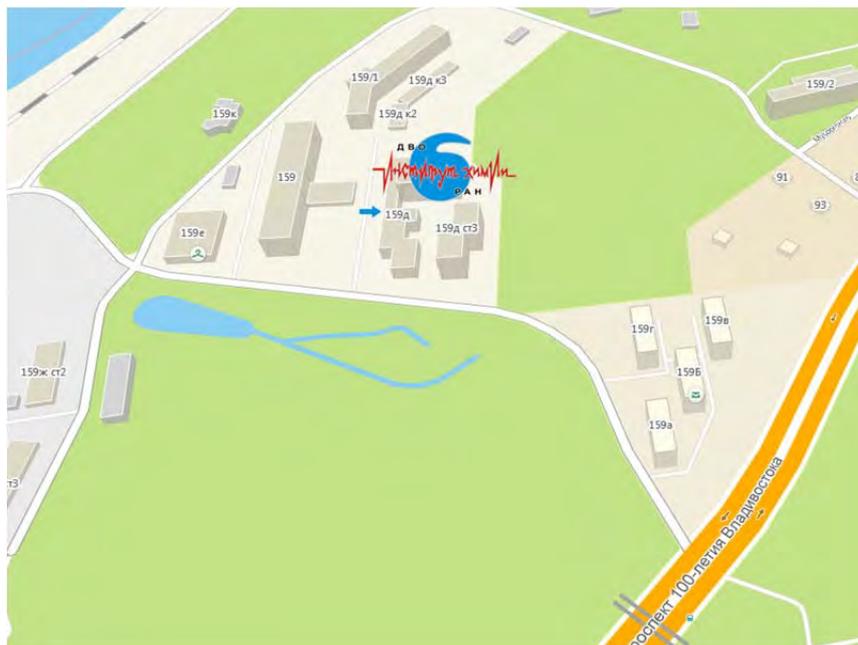
Методами ЯМР, ДСК и РФА исследованы ионная подвижность и фазовые переходы (ФП) в кристаллических фазах переменного состава $A_{1-x}B_xSb_2F_7$, $A_{1-x}B_xSbF_4$, ($A, B = K, Cs, Rb, NH_4$). Анализ спектров ЯМР ^{19}F , 1H этих фаз и модельных соединений позволил установить температурные интервалы, в которых реализуются различные виды ионных движений, оценить корреляционные частоты этих движений. Полученные результаты позволяют рассматривать изученные объекты как основу для получения материалов с высокой ионной проводимостью.

Получены и исследованы методами ЯМР и импеданса новые твердые растворы с флюоритовой структурой состава $9BaF_2-50BiF_3-41KF$ (I), $9CdF_2-50BiF_3-41KF$ (II), $9PbF_2-50BiF_3-41RbF$ (III), которые могут быть отнесены к суперионным проводникам. Установлено, что наблюдаемая трансформация спектров ЯМР ^{19}F твердых растворов I – III при вариациях температуры связана с изменением характера ионной подвижности во фторидной подрешетке. Переход ионов фтора от жесткой решетки (ниже 180 К) к трансляционной диффузии (выше 300 К для III и 350 К для I, II) происходит через промежуточный этап, связанный с реализацией локальных движений. Определены интервалы температур, в которых наблюдается определенный вид ионной подвижности во фторидной подрешетке исследованных твердых растворов.

Методами ЯМР и ЯМР ВМУ ^{31}P , ^{19}F , 1H исследованы полноразмещенные и кислые фторофосфатометаллаты (ФФМе) составов $MHf_2PO_4 \cdot 0.5H_2O$ ($M = Rb, Cs$), $CsMe_2F_6PO_4 \cdot 4H_2O$ ($Me = Zr, Hf$), $K_3Zr_3F_3(HPO_4)_3(PO_4)_2$, $Rb_3Zr_3F_3(HPO_4)_3(PO_4)_2$, $Rb_3Hf_3F_3(HPO_4)_3(PO_4)_2$, $CsHf_2F_2(HPO_4)_2PO_4 \cdot 2H_2O$. На основании данных ЯМР предложены схемы строения структурных фрагментов этих соединений.

Методом ЯМР (^{51}V , $^{6,7}Li$, ^{31}P , ^{23}Na) исследованы особенности структуры и дефектного строения соединений, представляющих интерес для использования в качестве катодных материалов: $LiVO_3$, $LiVO_2$, $NaVO_3$, $Li_2Fe_xMn_{1-x}P_2O_7$ ($x=0, 0.5, 0.75, 1$), $LiVPO_4$, $Li_3V_2(PO_4)_3$, Li_2FePO_4F , Na_2FePO_4F , $LiNaFePO_4F$ и др.

КОНТАКТЫ



690022, Владивосток, проспект Столетия Владивостока, 159 д. к. 105-109.

www.ich.dvo.ru/~nmr/

Тел. 8-(423)-2215328

kavun@ich.dvo.ru

ОБОРУДОВАНИЕ



Твердотельный ЯМР спектрометр Bruker AVANCE AV 300 с возможностью съемки по ^{19}F , ^1H , ^{109}Ag - ^{31}P , ^{203}Tl , ^{205}Tl , MAS-датчики 4 и 7 мм со скоростью вращения до 18 кГц, возможностью съемки ядер ^{15}N - ^{31}P и дополнительным каналом для протонов или фтора. Мощность передатчиков H/F и X - 1 кВт, максимальная полоса SWH = 5 МГц.



Твердотельный ЯМР спектрометр с непрерывной разверткой SWL-3-100, протонная частота 84 МГц, ядра - фтор и водород.



Bruker WP-80 для съемки растворов, ядра ^{19}F , ^1H , ^{17}O - ^{31}P и др., частота резонанса на ядре водорода 80 МГц.

СОТРУДНИЧЕСТВО

Наша лаборатория плодотворно сотрудничает с другими лабораториями и организациями:
ИХ ДВО РАН

- Лаборатория оптических материалов
- Лаборатория химии редких металлов
- Лаборатория рентгеноструктурного анализа
- Лаборатория сорбционных процессов
- Лаборатория фторидных материалов

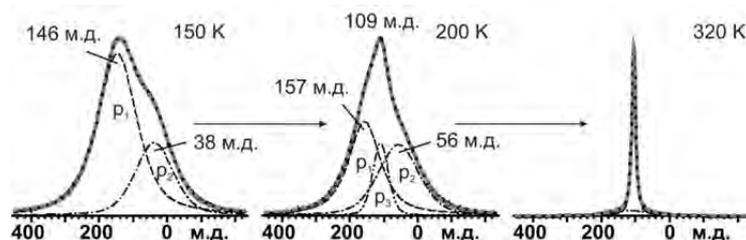
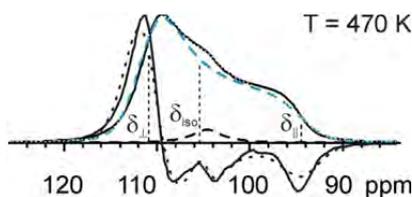
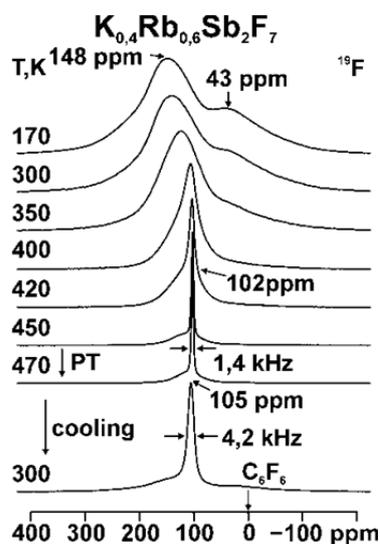
ИНХ СО РАН

ИХТТМ СО РАН

ИХТРЭМС КНЦ РАН

Дальневосточный федеральный университет

Исследование фтор-ионной подвижности в соединениях, содержащих трифториды сурьмы и висмута



В.Я. Кавун, М.М. Полянцев, Л.А. Земнухова. *Ионная подвижность и фазовый переход в гептафтородиантимонате(III) $Cs_{0.4}Rb_{0.6}Sb_2F_7$* // Журн. структур. химии. 2015. Т.56. № 4. С. 804–806.

V.Ya. Kavun, M.M. Polyantsev, L.A. Zemnukhova, A.B. Slobodyuk, V.I. Sergienko. *Ion mobility and phase transitions in heptafluorodiantimonates(III) $Cs_{(1-x)}(NH_4)_xSb_2F_7$ and $K_{0.4}Rb_{0.6}Sb_2F_7$ according to NMR and DSC data* // J. Fluor. Chem. 2014. Vol. 168. P. 198 – 203.

Кавун В.Я., Полянцев М.М., Земнухова Л.А., Бровкина О.В., Сергиенко В.И. *Ионная подвижность и фазовые переходы в соединениях $K_{0.65}Rb_{0.35}SbF_4$ и $(NH_4)_{0.4}Rb_{0.6}SbF_4$ по данным ЯМР и ДСК* // Журн. структур. химии. 2014. Т. 55. № 5. С. 962 – 965.

L.A. Zemnukhova, A.A. Udovenko, N.V. Makarenko, G.A. Fedorishcheva, M.M. Polyantsev, V.Ya. Kavun. *Synthesis, crystal structure, and properties of pentadecafluorotetraantimonate(III) $CsRb_2Sb_4F_{15}$* // J. Fluor. Chem. 2015. Vol. 178. P. 131–135.

В.Я. Кавун, В.И. Сергиенко. *Спектроскопия ЯМР твердых растворов, содержащих трифторид висмута* // Вестник ДВО РАН. 2015. № 4. С. 8 – 19.

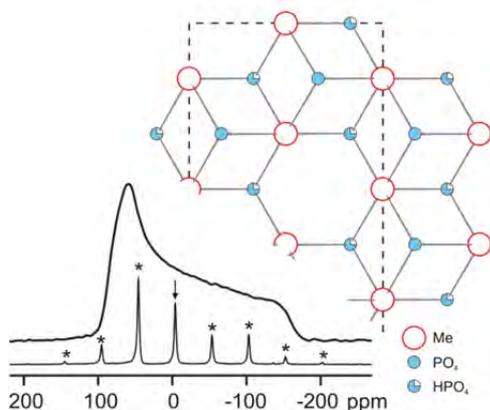
V.Ya. Kavun, N.F. Uvarov, E.B. Merkulov, M.M. Polyantsev, A.S. Ulihin, V.K. Goncharuk, and V.I. Sergienko. *Ion mobility and conductivity in fluorite-type solid solutions in $KF-MF_2-BiF_3$ systems ($M = Ba, Cd$) according to ^{19}F NMR and conductivity data* // Solid State Ionics 2015. Vol. 274. P. 4–7.

В.Я. Кавун, Н.Ф. Уваров, А.Б. Слободюк, М.М. Полянцев, А.С. Улихин, Е.Б. Меркулов, В.К. Гончарук. *Ионная подвижность и проводимость в твердых растворах в системе $KBiF_4-ZrF_4$* // Электрохимия. 2015. Т. 51. № 6. С. 589–594.

В.Я. Кавун, Е.Б. Меркулов, М.М. Полянцев, Р.М. Ярошенко, В.К. Гончарук. *Фазовые переходы и ионная подвижность в твердых растворах в системе $BiF_3-KF-ZrF_4$* // Журн. структур. химии. 2015. Т.56. № 4. С. 698–701.

V.Ya. Kavun, N.F. Uvarov, V.K. Goncharuk, E.B. Merkulov, A.S. Ulihin, I.A. Telin, V.I. Kharchenko. *Ion mobility and transport properties of fluorite-type solid solutions in the PbF_2-BiF_3-MF systems ($M = Rb, Cs$) according to NMR and conductivity data* // Solid State Ionics. 2014. Vol. 257. P. 17–22.

Исследование строения, фазовых переходов, ионных движений в других комплексных соединениях



Слободюк А.Б., Диденко Н.А., Годнева М.М. Исследование строения гидратированных фторофосфатоцирконатов (гафнатов) методом ЯМР // ЖСХ. 2015. Т. 56. С. 1111-1117.

V.Ya. Kavun, R.L. Davidovich, V.B. Logvinova, E.B. Merkulov, V.V. Tkachev. Synthesis, crystal structure, and NMR investigation of 4-amino-1,2,4-triazolium hexafluoridotitanate(IV) // J. Fluor. Chem. 2015. Vol. 178. P. 68-72.

Kseniya A. Gayvoronskaya, Nina A. Didenko, Arseniy B. Slobodyuk, Andrey V. Gerasimenko, Valeriy Ya. Kavun. Synthesis and investigation of a new coordination compound: Ammonium octafluoridoindate-zirconate heptahydrate $NH_4InZrF_8 \cdot 7H_2O$ // J. Fluor. Chem. 2015. Vol. 180. P. 144-151.

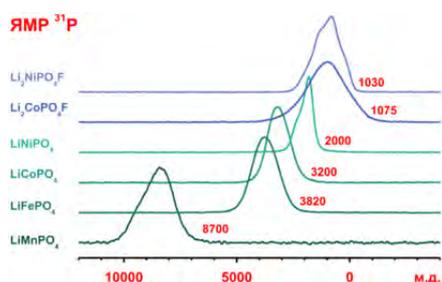
ЯМР - исследование фторидных стекол

Vladimir K. Goncharuk, Irina G. Maslennikova, Valerii I. Kharchenko, Valeriy Ya. Kavun, Arseniy B. Slobodyuk, Sergey A. Sarin. A study of the glass formation and crystallization in the mixed fluorozirconate-phosphate systems $ZrF_4-BaF_2(SnF_2)-NaPO_3$ // J. Non-Crystal. Solids. 2016. Vol. 431. P. 118-125.

Leonid N. Alexeiko, Valeriy Ya. Kavun, Valeriy I. Kharchenko, Arseniy B. Slobodyuk, Irina G. Maslennikova, Vladimir K. Goncharuk. Influence of the lead difluoride on ion mobility and thermal behavior of glasses in the $TeO_2-PbO-P_2O_5-PbF_2$ system according to NMR and DTA data // J. Non-Crystal Solids. 2014. Vol. 401. P. 119 - 123.

V.Ya. Kavun, E.I. Voit, R.M. Yaroshenko, V.K. Goncharuk. Structure and ion mobility in glasses in the $BiF_3-PbF_2-ZrF_4$ systems studied by Raman and NMR spectroscopy // J. Non-Crystal Solids. 2014. Vol. 401. P. 224 - 231.

ЯМР соединений, содержащих парамагнитные ионы



N.V. Kosova, A.M. Tsapina, A.B. Slobodyuk, S.A. Petrov. Structure and electrochemical properties of mixed transition-metal pyrophosphates $Li_2Fe_{1-y}Mn_yP_2O_7$ ($0 \leq y \leq 1$) // Electrochimica Acta. 2015. V. 174. P. 1278-1289.

N.V. Kosova, D.O. Rezepova, A. B. Slobodyuk. Effect of annealing temperature on the structure and electrochemistry of $LiVO_3$ // Electrochimica Acta. 2015. V. 167. P. 75-83.

N.V. Kosova, V.R. Podugolnikov, E.T. Devyatkina, A.B. Slobodyuk. Structure and electrochemistry of $NaFePO_4$ and Na_2FePO_4F cathode materials prepared via mechanochemical route // Mat. Res. Bull. 2014. Vol. 60. P. 849-857.

N.V. Kosova, E.T. Devyatkina, A.B. Slobodyuk, A.K. Gutakovskii. $LiVPO_4/Li_3V_2(PO_4)_3$ nanostructured composite cathode materials prepared via mechanochemical way // J. Solid State Electrochem. 2014. Vol. 18. P. 1389-1399.

КЛЮЧЕВЫЕ СОТРУДНИКИ



Кавун Валерий Яковлевич, *д.х.н., заведующий лабораторией*

kavun@ich.dvo.ru



Слободюк Арсений Борисович, *к.х.н., с.н.с.*

Научные интересы: строение твердых растворов, твердые электролиты, ЯМР координационных соединений

ampy@ich.dvo.ru



Диденко Нина Алексеевна, *н.с.*

Научные интересы: Строение и свойства соединений циркония, водородная связь, дифференциальный термический анализ



Ткаченко Иван Анатольевич, *к.х.н., с.н.с.*

Научные интересы: магнитоупорядоченные вещества и материалы на их основе

tkachenko@ich.dvo.ru



Телин Илья Анатольевич, *аспирант*

Научные интересы: строение и свойства фторидных стекол



Полянтцев Михаил Михайлович, *аспирант*

Научные интересы: фтор-ионные проводники на основе неполновалентных элементов с высокой поляризуемостью

poliantsev@ich.dvo.ru

НЕКОТОРЫЕ ЛАБОРАТОРИИ, НЕ ВОШЕДШИЕ В СБОРНИК

С ЗАПАДА НА ВОСТОК, С УКАЗАНИЕМ КОНТАКТНЫХ ЛИЦ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГ

Институт высокомолекулярных соединений РАН, группа спектроскопии полимеров
к.ф.-м.н. Анатолий Владимирович Добродумов, dobrodumov@bruker.ru

МОСКВА

ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН, лаб. металлокомплексных и наноразмерных катализаторов
член-корр., д.х.н., проф. Валентин Павлович Анаников, valentin.ananikov@gmail.com

ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН, лаборатория ядерного магнитного резонанса
д.х.н. Александр Сергеевич Перегудов, asp@ineos.ac.ru

ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН, группа электронного парамагнитного резонанса
д.х.н., проф. Станислав Пантелеймонович Солодовников, solod@ineos.ac.ru

НИЦ «Курчатовский институт», (нано-био-инфо-когно)-Центр
к.б.н., вед.н.с. Павел Менделеевич Барановский, pbaranovsky@yandex.ru

Университет дружбы народов, ЦКП «Научно-образовательный центр»
проф. д.х.н. Геннадий Александрович Калабин, kalabinga@mail.ru

ЧЕРНОГОЛОВКА

Институт проблем химической физики РАН, лаборатория ЭПР-спектроскопии макромолекул
д.ф.-м.н. Виктор Иванович Криничный, kivi@cat.icp.ac.ru

ЙОШКАР-ОЛА

Поволжский государственный технологический университет, кафедра физики
д.х.н., проф. Юрий Борисович Грунин, GruninYB@marstu.net

КАЗАНЬ

ИОФХ им. А.Е. Арбузова РАН, лаборатория радиоспектроскопии
д.х.н., проф. Шамиль Камильевич Латыпов, lsk@iopc.ru

СЫКТЫВКАР

Институт химии Коми НЦ УрО РАН, лаборатория физико-химических методов исследования
д.х.н. Раис Асхатович Садыков, sadykov-ra@chemi.komisc.ru

ПЕРМЬ

Институт технической химии УрО РАН., лаборатория синтеза активных реагентов
д.х.н., проф. Валентин Петрович Фешин, vpfeshin@mail.ru

ЕКАТЕРИНБУРГ

Институт органического синтеза УрО РАН. Лаборатория спектральных методов исследования
к.х.н. Михаил Исаакович Кодесс, nmr@ios.uran.ru

НОВОСИБИРСК

Новосибирский гос. университет, факультет естественных наук, каф. общей химии

к.х.н., доцент, ст. преп. Илья Владимирович Ельцов, eiv@fen.nsu.ru

МТЦ СО РАН, группа многоспиновых координационных соединений

д.х.н., проф. Виктор Иванович Овчаренко, ovchar@tomo.nsc.ru

МТЦ СО РАН, группа теоретической спиновой химии

д.ф.-м.н., проф. Никита Николаевич Луксен, luk@tomo.nsc.ru

ИНХ им. А.В. Николаева, лаб. физической химии конденсированных сред

д.ф.-м.н., с.н.с. Светлана Геннадьевна Козлова, sgk@niic.nsc.ru

ИНХ им. А.В. Николаева, лаб. физико-химических методов исследования газовых сред

д.ф.-м.н. Владимир Акимович Надолинный, spectr@niic.nsc.ru

ИХКГ им. В.В. Воеводского СО РАН, лаборатория магнитных явлений

д.ф.-м.н., проф. Петр Александрович Пуртов, Purtov@kinetics.nsc.ru

ИХКГ им. В.В. Воеводского СО РАН, группа “Гидроскоп”

к.ф.-м.н. Евгений Васильевич Кальнеус, kalneus@kinetics.nsc.ru

ИРКУТСК

Иркутский ИХ им. А.Е. Фаворского СО РАН, лаборатория структурной химии

д.х.н., проф. Леонид Борисович Кривдин, krivdin_office@irioch.irk.ru

Иркутский национальный исследовательский технический университет, кафедра физики

д.х.н., проф. Владимир Кириллович Воронов, voronov@istu.edu

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ФАМИЛИЙ

А		Г		И	
Абоскалова Н.И.	45	Габриенко А.А.	170	Иванов А.А.	87
Авилова И.А.	73	Газизулин Р.Р.	88	Иванов А.Ю.	16
Аганов А.В.	84	Галиуллина Л.Ф.	85	Иванов К.Л.	141
Акчурина О.В.	125	Гафуров М.Р.	88	Ивахненко Е.П.	83
Алакшин Е.М.	87	Гиба И.С.	17	Идрисова С.М.	116
Александров А.С.	86	Гизатуллин Б.И.	86	Иевлев А.В.	30, 39
Аминова Р.М.	85	Гиндин В.А.	16	Ильясов К.А.	84
Анаников В.П.	204	Глазачев Ю.И.	188	Иртегова И.Г.	157
Андреев А.С.	167	Гнездилов О.И.	87	Исаев Н.П.	188
Анисимов Н.В.	56	Гончарук М.	53	Исламов Д.Н.	116
Анисимов О.А.	194	Гончарук С.	52		
Анищик С.В.	194	Городецкий А.А.	157	К	
Арзуманов С.С.	170	Гребенюк Е.И.	17	Кавун В.Я.	203
Арсеньев А.С.	52	Гревцев А.С.	17	Калабин Г.А.	204
Архипов Р.В.	86	Грунин Ю.Б.	204	Кальнеус Е.В.	205
Ахметов М.М.	99	Гуляев М.В.	56	Кандаурова В.В.	156
				Каратаева Ф.Х.	85
				Кашлакова В.И.	157
Б		Д		Кириллов В.Л.	179
Багрянская Е.Г.	155	Дзюба С.А.	188	Кирьянов И.И.	118
Багрянский В.А.	194	Диденко Н.А.	203	Кирютин А.С.	141
Байкова И.П.	125	Добродумов А.В.	204	Клочков А.В.	87
Байчурин Р.И.	45	Донец А.В.	30, 37	Клочков В.В.	84
Барановский П.М.	204	Дорогиницкий М.М.	86	Князев П.А.	83
Берестовицкая В.М.	45	Дубинный М.	53	Ковтунов К.В.	135
Блохин Д.С.	85	Дуглав А.В.	87	Ковязин П.В.	111
Богайчук А.В.	7			Кодесс М.И.	204
Боровков В.И.	194	Е		Козлова С.Г.	205
Бородкин Г.С.	81	Егоров А.В.	30, 35	Колоколов Д.И.	170
Бородкина И.Г.	81	Егоров А.В.	87	Колягин Ю.Г.	57
Бочаров Э.	52	Еличев А.А.	125	Комолкин А.В.	29, 32
Бочарова О.	52	Ельцов И.В.	205	Компаньков Н.Б.	156
Будынина Е.М.	58	Ельцов О.С.	132	Конов А.Б.	99
Бурмистров В.И.	7	Еремин М.В.	87	Коптюг И.В.	135
Буруева Д.Б.	135	Ефимов С.В.	85	Корчагина Д.В.	156
				Крестина М.С.	135
В		Ж		Кривдин Л.Б.	205
Вавилова Е.Л.	99	Живонитко В.В.	135	Кригер Д.В.	156
Валидов А.А.	99	Жиглей Э.С.	17	Кричный В.И.	204
Васильев С.Г.	73			Крумкачаева О.А.	150
Васильева Н.В.	157	З		Кузьмин В.В.	88
Вебер С.Л.	150	Забродин В.А.	73	Кузьмичев П.	53
Верховлюк В.Н.	194	Зарипов Р.Б.	99	Кулик Л.В.	189
Вовк М.А.	16	Зверев Д.Г.	88	Куприянов П.А.	30, 38
Волков В.И.	73			Куприянова Г.С.	7
Волков М.Ю.	99				
Воронкова В.К.	98				
Воронов В.К.	205				

Л		О			
Лапина О.Б.	167	Овчаренко В.И.	205	Сковпин И.В.	135
Латыпов В.А.	99	Овчинников И.В.	98	Скорова А.Б.	156
Латыпов Ш.К.	204	Орехов В.П.	125	Скрынников Н.Р.	42
Лесовой Д.	53	Орлинский С.Б.	84	Слепнева И.А.	188
Лобов А.Н.	126	Орлова А.Н.	7	Слесаренко Н.А.	73
Лузгин М.В.	170			Слободюк А.Б.	203
Лукзен Н.Н.	205	П		Смекалова Т.Н.	30
Лысова А.А.	135	Павлова О.С.	57	Смирнов С.Н.	16
		Павлова Т.Д.	132	Солодовников С.П.	204
М		Панов М.С.	142	Сосновский Д.В.	142
Мазур А.С.	17	Папуловский Е.С.	167	Спирихин Л.В.	123, 125
Макаренко С.В.	45	Парамонов А.	52	Станкевич Н.В.	81
Мальцев Ю.Ф.	81	Парфенова Л.В.	111	Стась Д.В.	194
Мамадазизов С.	7	Перегудов А.С.	204	Степанов А.Г.	170
Маматюк В.И.	155	Петров А.С.	132	Суханов А.А.	99
Мамин Г.В.	88	Петровский Е.Д.	135	Сухаржевский С.М.	17
Манцызов А.Б.	56	Петухов В.Ю.	98		
Марк С.Р.А.	157	Пирогов Ю.А.	56	Т	
Маркелов Д.А.	30	Плешкова Н.В.	156	Тагиров М.С.	84
Мартьянов О.Н.	179	Польшаков В.И.	56	Тарасов В.П.	73
Марьясов А.Г.	188	Полянцев М.М.	203	Тарасов В.Ф.	98
Матвеев В.В.	29, 34	Правдивцев А.Н.	142	Телин И.А.	203
Матвеева А.Г.	188	Пуртов П.А.	205	Терегулов И.Х.	126
Мершиев И.Г.	7			Ткаченко И.А.	203
Метелица И.А.	81	Р		Толстой П.М.	16
Мещерякова Е.С.	118	Родионов А.А.	88	Трухан С.Н.	179
Мингалиева Л.В.	99	Рознятовский В.А.	58	Тулябаев А.Р.	118
Минеев К.	52	Романов А.С.	135	Тюмкина Т.В.	111, 116
Мозговой О.С.	118	Романова И.В.	88	Тютюкин К.В.	29, 35
Молин Ю.Н.	194	Рудакова М.А.	86		
Молчанов В.В.	7			У	
Морозова О.Б.	141	С		Уваров М.Н.	189
Мунавиров Б.В.	86	Савельев О.Ю.	57	Усачев К.С.	85
Муслухов Р.Р.	125	Савинков А.В.	87	Устынюк Ю.А.	57
Мухамедшин И.Р.	87	Сагдеев Р.З.	134		
		Садыков Р.А.	204	Ф	
Н		Салихов К.М.	98	Фадеев Д.С.	156
Надеждин К.	53	Салихов Ш.М.	126	Фазлижанов И.И.	99
Надолинный В.А.	205	Сальников Г.Е.	156	Фалин М.Л.	99
Насибулов Е.А.	142	Сальников О.Г.	135	Фаткуллин Н.Ф.	86
Нестеров Н.С.	179	Самойлова Р.И.	188	Фатыхов А.А.	125
Нечаев М.С.	58	Сафиуллин К.Р.	88	Федин М.В.	150
Нольде С.	53	Свиридов Е.А.	156	Фешин В.П.	204
		Северин Е.А.	7	Филиппов А.В.	86
		Синявский Н.Я.	7	Фит Х.-М.	141
		Скирда В.Д.	84	Фишман Н.Н.	142
				Фролов В.В.	29, 35

Х		Ш		Ю	
Хабибулин Д.Ф.	167	Шакиров М.М.	156	Юданов В.Ф.	179
Хайрутдинов Б.И.	85	Шакуров Г.С.	98	Юльметов А.Р.	85
Халилов Л.М.	108	Шевелева А.М.	150	Юрковская А.В.	141
Халиуллина А.В.	86	Шеляпина М.Г.	29, 33	Юсупов Р.В.	88
Халфина И.А.	157	Шенкарев З.	52		
Хохлов А.Р.	56	Шернюков А.В.	156	Я	
		Шишлов Н.М.	125	Якушкин С.С.	179
Ц		Шмырева А.А.	17	Яцык И.В.	99
Цветков Ю.Д.	188	Шпилевой А.А.	7		
Цмокалюк А.Н.	132	Штукина Т.С.	132		
		Шубин А.А.	167		
Ч		Шумм Б.А.	73		
Чепурной П.Б.	81	Шундрин Л.А.	155		
Черноусов Ю.Д.	194				
Черныш Ю.Е.	81				
Чернышев Ю.С.	29, 37				
Черняк А.В.	73				
Чертков В.А.	57				
Чижик В.И.	29, 31				
Чудин А.В.	30, 39				
Чуйков И.П.	156				