

Научные руководители и темы дипломных работ на 2019-2020 учебный год
(список доступен на сайте кафедры hf.nsu.ru)

№	ФИО руководителя	Лаборатория, комната	Телефон	Электронная почта	Тема работы	Краткое описание работы (какая задача, какие методы планируется применять)
Институт химической кинетики и горения СО РАН (Институтская, 3); www.kinetics.nsc.ru						
1	д.х.н. Бакланов Алексей Васильевич, к.ф.-м.н. Богомолов Александр Сергеевич	Группа молекулярной фотодинамики, к. 303	330 76 23	baklanov@kinetics.nsc.ru bogomolov@kinetics.nsc.ru	1. Супрамолекулярные фотохимические процессы в слабосвязанных молекулярных комплексах. 2. Необычная кинетика термоинактивации белковых молекул.	1. Экспериментальное изучение с помощью техники визуализации карт скоростей фотофрагментов. 2. Теоретическое исследование.
2	д.ф.-м.н. Боровков Всеволод Игоревич	Лаборатория быстропротекающих процессов, к. 122	330 97 92	borovkov@kinetics.nsc.ru	1. Исследование первичных катион-радикалов в поликристаллических n-алканах. 2. Исследование бимолекулярных реакций переноса электрона на полимерные молекулы в растворах. 3. Исследование стабильности анион-радикалов фтораренов в растворах.	Все предлагаемые дипломные работы для получения степени бакалавра направлены на знакомство с рядом уникальных подходов к изучению структуры и динамики короткоживущих ион-радикальных состояний молекул в конденсированной среде, а также кинетики их реакций в наносекундном диапазоне времен. Работы проводятся на уникальном флуориметре, использующем для создания ион-радикалов короткие импульсы рентгеновского излучения. В основе применяемых методик лежат эффекты спиновой корреляции в первичных ион-радикальных парах в облученной среде в различных магнитных полях и особенности неомогенной кинетики рекомбинации таких пар. При проведении исследований планируется применение квантовохимических расчетов характеристик ион-радикалов и компьютерного моделирования внутримолекулярных процессов. После знакомства с основами экспериментальных и теоретических подходов возможно расширение тематики (например, исследование первичных полярных пар в сопряженных полимерах и т.п.).
3	к.х.н. Валиулин Сергей Владимирович, к.ф.-м.н. Карасев Владимир Васильевич	Лаборатория наночастиц, к. 107	333 20 44 333 32 44	valiulin@kinetics.nsc.ru karasev@kinetics.nsc.ru	Исследование механизма образования нанозеролевых форм лекарственных веществ и влияния их физико-химических свойств на биологическую активность.	
4	д.ф.-м.н. Дзюба Сергей Андреевич, Голышева Елена Александровна	Лаборатория химии и физики свободных радикалов, к. 223	8 923 170 28 10	elenabiochem@gmail.com	Биофизика мембран и белков: исследование методом ЭПР спиновых меток.	Исследование структуры и подвижности биологических систем методом электронного парамагнитного резонанса спиновых меток.
5	д.ф.-м.н. Докторов Александр Борисович, Федоренко Станислав Григорьевич	Лаборатория теоретической химии, к. 102, 123	333 28 55 333 15 03	doktorov@kinetics.nsc.ru fedorenk@kinetics.nsc.ru	Изучение транспорта свободных носителей (электроны, поляроны, дырки, экситоны) в неупорядоченных системах.	Расчет прыжковой подвижности носителей заряда или электронного возбуждения, движущихся по пространственно разупорядоченной системе активных сайтов в кристалле. Предполагаются аналитические и численные методы исследования, диаграммная техника. Активное взаимодействие с экспериментом и МК моделированием (Osnabrueck University, Germany; Universita di Padova, Italy).
6	д.ф.-м.н. Замашиков Валерий Владимирович	Лаборатория физики и химии горения газов	333 22 96	albor@kinetics.nsc.ru	Измерение основных характеристик сферической волны горения в бомбе постоянного объема.	Теория распространения сферически расширяющегося пламена достаточно хорошо развита. Это позволяет, используя запись давления, полученную при сгорании горючей смеси в замкнутом объеме, и скоростную видео регистрацию, получить такую важную характеристику, как нормальную скорость. Основные методы исследования: теневая скоростная видео регистрация, тензометрия.
7	к.ф.-м.н. Карасев Владимир Васильевич, к.х.н. Валиулин Сергей Владимирович	Лаборатория горения конденсированных систем, к. 302	333 20 44 333 32 44	valiulin@kinetics.nsc.ru karasev@kinetics.nsc.ru	Изучение комплекса параметров фрактальных агрегатов оксидных наносферул – продуктов горения металлических (Al, Ti, Mg) микрочастиц	Объект исследования: фрактальные агрегаты оксидных наносферул – продуктов горения металлических (Al, Ti, Mg) микрочастиц. Исследуемые характеристики агрегатов: светорассеяние, морфология (структура), седиментация, конвективная диффузия в атмосфере, фотофорез, термоионизационная зарядка (коагуляция). Задача: Подбор оксидного аэрозоля с максимальным светорассеиванием при минимальной седиментации. Методы: оптические, включая видеомикроскопию аэрозоля и электронную микроскопию. Перспективное приложение: геофизический проект – подавление глобального потепления путем глобального «потемнения», аналогично действию вулканического дыма, но без негативного эффекта сульфатного аэрозоля. [Atmos. Chem. Phys., 15, 11835–11859, 2015; Atmos. Chem. Phys., 16, 2843–2862, 2016]. «Доставка» наноксидного дыма и генерация в стратосфере с помощью перспективных экологических ракет с гибридным двигателем: горючее-металлический порошок, окислитель – забортный кислород.

8	к.ф.-м.н. Князьков Денис Анатольевич, к.х.н. Шамаков Андрей Геннадьевич, к.ф.-м.н. Герасимов Илья Евгеньевич	Лаборатория кинетики процессов горения, экспериментальный корпус	333 33 46	shmakov@kinetics.nsc.ru daknyazkov@gmail.com gerasimov@kinetics.nsc.ru	1. Разработка методики определения концентраций промежуточных продуктов горения в пламени по его катионному составу. 2. Исследование химической структуры пламен жидких топлив при повышенных давлениях. 3. Экспериментальное и численное исследование химической структуры холодных пламен.	1. Как известно, в процессе горения в пламени образуются ионы, которые относительно легко поддаются детектированию. Измерив концентрации различных ионов, можно вычислить концентрации молекул, играющих важную роль в процессах горения. В работе предстоит разработать методику для регистрации в пламени естественно возникающих катионов на базе молекулярно-пучковой масс-спектрометрической (МПМС) установки Hiden HPR-60 MBMS; разработать модель, позволяющую описать связи между процессами формирования катионов и нейтральных компонентов пламени, в том числе тех, регистрация которых в пламенах другими методами невозможна. 2. Метод МПМС позволяет измерять концентрации важных промежуточных соединений в пламени, включая радикалы. Особый интерес представляют данные о химической структуре пламен при давлениях выше атмосферного. В работе необходимо будет спроектировать камеру и систему подачи топлива высокого давления, исследовать химическую структуру пламен жидких углеводородных топлив при давлениях до 10 атм и провести сравнительный анализ полученных данных с результатами химико-кинетического моделирования. 3. Так называемые "холодные" пламена представляют собой низкотемпературное окисление углеводородов и характеризуются сложной многостадийной кинетикой. В последнее время интерес к "холодному" горению значительно возрос в связи с необходимостью решения проблемы стука в двигателях. Перед студентом будет стоять задача сконструировать горелку для стабилизации холодных пламен различных топлив, провести измерение химической структуры таких пламен и моделирование кинетики протекающих реакций.
9	д.ф.-м.н. Коробейничев Олег Павлович, д.ф.-м.н. Палецкий Александр Анатольевич, к.ф.-м.н. Терещенко Александр Георгиевич	Лаборатория кинетики процессов горения, экспериментальный корпус, к.30, к.16, к.29	3332852, 3333346	korobein@kinetics.nsc.ru paletsky@kinetics.nsc.ru tereshag@kinetics.nsc.ru	1. Изучение механизма снижения горючести пенополиуретана добавками антипиренов. 2. Разработка двумерной физико-химической и математической модели распространения пламени по полимерным материалам с добавками антипиренов и без них. 3. Изучение механизма распространения пламени по слою хвои (низовой пожар). 4. Кинетика высокоскоростного термического разложения полиуретанов низкой плотности с добавками антипиренов и без них.	1.Изучение механизма снижения горючести пенополиуретана добавками антипиренов на основе всестороннего изучения скорости и структуры при распространении пламени в горизонтальном и вертикальном (сверху вниз и снизу вверх) направлении с помощью оригинальных физико-химических методов, включая микротермопарный метод и зондовую масс спектрометрию с использованием Hiden HPR-60. 2 .Разработка двумерной физико-химической и математической модели распространения пламени по полимерным материалам с добавками антипиренов и без них на основе численного моделирования с учетом кинетики пиролиза полимеров и химических реакций окисления летучих продуктов пиролиза в пламени. Сопоставление с экспериментальными данными по скорости пламени, тепловой и химической структуры пламени. 3. Изучение механизма распространения пламени по слою хвои (низовой пожар) на основе измерений скорости распространения, тепловой и химической структуры пламени, тепловых потоков из пламени в слой, а также механизма гашения пламени аэрозолями водных растворов антипиренов. 4. Полиуретан с низкой плотностью в настоящее время является актуальным теплоизолирующим строительным материалом. В ходе работы планируется определить кинетику термического разложения полиуретанов с добавками антипиренов и без них при высоких темпах нагрева, реализуемых при распространении пламени по поверхности полимеров. Полученные данные будут использованы для разработки модели горения, способной предсказывать скорость распространения пожаров, а также для разработки полиуретанов с пониженной горючестью.
10	д.ф.-м.н. Медведев Николай Николаевич	Лаборатория молекулярной динамики и структуры, к. 319	333 28 54	nikmed@kinetics.nsc.ru	Компьютерное моделирование и анализ структуры сложных молекулярных систем	Изучение на молекулярном уровне структуры и динамики водных растворов органических веществ, моделирование взаимодействия липидных мембран с водой и мембраномодифицирующими молекулами. Используется современное молекулярно-динамическое моделирование и оригинальные методы анализа компьютерных моделей сложных молекулярных систем.
11	к.х.н. Поздняков Иван Павлович	Лаборатория фотохимии, к. 313	333 23 85, 8 913 776 09 01	pozdneyak@kinetics.nsc.ru	Экологическая фотохимия в водных растворах	Изучение механизмов и продуктов фотодеградации приоритетных загрязнителей в водных растворах для разработки новых фотохимических подходов к водоочистке. Комбинирование времязрешенных методов (лазерный импульсный фотолиз, пикосекундная флуоресценция) для идентификации короткоживущих интермедиатов с методами высокоэффективной хроматографии, масс-спектрометрии и оптической спектроскопии для определения природы конечных фотопродуктов и квантового выхода фотопроцессов.

12	д.х.н. Поляков Николай Эдуардович, к.ф.-м.н. Селютина Ольга Юрьевна	Лаборатория магнитных явлений, к. 312	8 923 145 80 67	olga.gluschenko@gmail.com	1. Исследование взаимодействия лекарств с клеточной мембраной методами ЯМР. 2. Исследование молекулярных механизмов доставки лекарств в составе супрамолекулярных комплексов. 3. Исследование хелатных комплексов лекарственных соединений с ионами металлов методами ЯМР-спектроскопии. 4. Исследование окислительно-восстановительных свойств хелатных комплексов противораковых хинонов и тиосемикарбазонов.	1. Исследование структуры и динамики липидов в составе модельной липидной мембраны при взаимодействии с различными средствами доставки и молекулами лекарств (хиноны, тиосемикарбазоны) методами ядерного магнитного резонанса. 2. Исследование хелатирующей способности лекарственных молекул в различных средах методами оптической спектроскопии и ядерного магнитного резонанса. 3. Исследование процессов переноса электрона и атома водорода при фотооблучении тиосемикарбазонов и их хелатных комплексов с ионами металлов переменной валентности (железа и меди) в гомогенных растворах в присутствии доноров и акцепторов электрона (ароматические аминокислоты, нуклеиновые основания, хиноны). 4. Изучение влияния хелаторов на процесс окисления липидов в темновых и фотоиндуцированных реакциях в модельных мембранах методами ядерного магнитного резонанса и химической поляризации ядер.
13	к.ф.-м.н. Уваров Михаил Николаевич	Лаборатория химии и физики свободных радикалов, к. 223	333 13 77	uvarov@kinetics.nsc.ru	Светоиндуцированные радикалы и продукты фотодеградации в активном слое органических фотовольтаических ячеек: исследования методами спектроскопии оптического поглощения, фотолуминоесценции, ЭПР-спектроскопии	Объекты исследования: органические полупроводящие материалы (как полимерные, так и непалимерные) и композиты, применяемые в качестве активных слоёв современных моделей органических солнечных батарей. Цель работы: описать механизмы возникновения стабильных радикалов - дефектов, образующихся в исследуемых материалах. Методы исследования: спектроскопия оптического поглощения, фотолуминоесцентная спектроскопия, спектроскопия электронного парамагнитного резонанса, в том числе спектроскопия двойного электрон-ядерного резонанса, приготовление образцов фотовольтаических ячеек и измерение их вольтамперных характеристик при различных условиях, приводящих к деградации активного слоя.
14	д.ф.-м.н. Черемисин Александр Алексеевич	Лаборатория дисперсных систем, к. 318	333 07 87	cheremisin@kinetics.nsc.ru	1. Развитие теории гравитофотофореза аэрозольных частиц и кластеров на основе численных экспериментов с использованием алгоритмов Монте-Карло. 2. Моделирование стохастической динамики кластерных аэрозолей в разреженных газах при фотофорезе на основе алгоритмов Монте-Карло. 3. Влияние фотофореза на перенос и стратификацию аэрозоля в средней атмосфере.	Общая тематика: перенос аэрозольных частиц и кластеров в разреженных газах и плазме при наличии внешних полей и излучений. 1. Методы численного эксперимента. Мы научились решать газокинетическое уравнение Больцмана на основе использования разработанных нами алгоритмов Монте-Карло, матриц переноса и приближения свободномолекулярного режима, что позволит провести численные эксперименты по изучению движения сложных аэрозольных систем - кластеров, которые при этом еще и поглощают внешнее и ИК излучения (фотофорез). 2. Написаны новые алгоритмы Монте-Карло, позволяющие рассчитывать стохастическую динамику аэрозольных кластеров. Это дает возможность провести численные эксперименты по изучению подавления фотофоретических эффектов в случае частиц и кластеров нано и переходного размеров. 3. Участие в проведении исследования переноса аэрозоля в средней атмосфере (от вулканов, пироккумулятивные облака в стратосфере, полярные стратосферные облака) и его стратификации (стратосфера, мезосфера, 10-90 км) с учетом влияния фотофоретических эффектов. Используется данные лидарных стратосферных станций (Томск, Якутск, Камчатка, Владивосток и др.), спутниковые данные о полях ветра и температуры в Северном полушарии и также другие спутниковые данные как со спутников, так и из ассимилированных баз данных (зарубежные).
15	к.ф.-м.н. Юркин Максим Александрович	Лаборатория Цитометрии и Биокинетики, корпус-модуль	8 913 928 05 82	yurkin@gmail.com	Разработка методов компьютерного моделирования взаимодействия электромагнитных волн с частицами https://drive.google.com/open?id=1glS-CbRsd_1oXri_rl-EoDNACY5Kr21K	Задачи математической физики, имеющие практическое применение в различных областях, от нанофотоники и биологии до метеорологии и астрофизики. Разработка эффективных алгоритмов моделирования взаимодействия электромагнитных волн с частицами на основе метода дискретных диполей. Реализация их в программном пакете ADDA. Предсказательное численное моделирование реальных объектов, в т.ч. в сотрудничестве с другими группами.
Международный томографический центр СО РАН (ул. Институтская, 3а), www.iae.nsk.su						
16	к.ф.-м.н. Зеленцова Екатерина Анатольевна	Лаборатория протеомики и метаболомики	8 913 923 55 15	zelentsova.ekaterina@gmail.com	Метаболомное профилирование или фотохимические свойства биологических объектов	Применение метаболомного профилирования для решения широкого профиля биомедицинских задач: установление молекулярных механизмов формирования и развития заболеваний, исследование постмортальных процессов в организме человека, установление метаболомного состава тканей модельных животных и др. В работе будет использован комплекс биохимических и физико-химических методов, таких как ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия, флуориметрия, оптическая спектроскопия и другие.
17	к.ф.-м.н. Яньшолё Вадим Владимирович	Лаборатория протеомики и метаболомики	8 983 121 65 52	vadim.yanshole@tomo.nsc.ru	Масс-спектрометрический анализ биологических молекул (метаболиты, белки, пептиды) для фундаментальных биологических и медицинских задач.	Разработка и применение ЯМР, хроматографических и масс-спектрометрических техник, методов подготовки биологических образцов, методов статистического анализа для решения фундаментальных биологических и медицинских задач.

Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН (пр. ак. Лаврентьева, 3); www.niic.nsc.ru						
18	д.ф.-м.н. Козлова Светлана Геннадьевна, к.ф.-м.н. Мирзаева Ирина Валерьевна	Лаборатория физической химии конденсированных сред	330 75 31, 8 913 944 88 07	sgk@niic.nsc.ru , dairdre@gmail.com	1. Спектроскопия ЯМР комплексных соединений переходных и постпереходных элементов. 2. Квантовохимические расчёты параметров ЯМР в таких соединениях с учётом релятивистских эффектов	1. Определение/подтверждение строения новых комплексных соединений переходных и постпереходных элементов с помощью спектроскопии ЯМР (Bruker Avance III 500 MHz). 2. Поиск корреляции особенностей строения таких соединений с параметрами ЯМР и выяснение роли релятивистских эффектов с помощью квантовохимических расчётов, которые предполагается выполнять в программных комплексах ADF (http://www.scm.com), Dirac (http://www.diracprogram.org/), Gaussian (http://gaussian.com/).
19	д.ф.-м.н. Надолинный Владимир Акимович	Лаборатория физико-химических методов исследования газовых сред, к. 113	330 95 15, 8 913 909 72 71	spectr@niic.nsc.ru	1. Исследование влияния примесных и собственных дефектов на магнитные и оптические свойства центров NV, SiV, GeV и SnV в алмазе, рассматриваемых в качестве перспективных элементов для различных квантовых приложений. 2. Исследование оптических и магнитных свойств перспективных комплексных соединений для создания OLED устройств.	Методы: ЭПР, люминесценция, квантово-химические расчёты
20	д.ф.-м.н. Окотруб Александр Владимирович, к.ф.-м.н. Седельникова Ольга Викторовна	Лаборатория физикохимии наноматериалов, к. 205	330 53 52, 8 903 936 59 60, 8 952 915 67 81, 8 960 789 20 38	spectrum@niic.nsc.ru , o.sedelnikova@gmail.com , fedoseeva@niic.nsc.ru	1. Структура и оптические свойства гибридных наноматериалов на основе углеродных нанотрубок и графена. 2. Квантово-химическое исследование электронной структуры и оптических свойств фторированного графита и его соединений включения. 3. Рентгеновская и рентгеноэлектронная спектроскопия модифицированных углеродных наноматериалов.	1. Исследование оптических спектров (люминесценция и поглощение) химически модифицированных углеродных наноструктур. Создание оптического стенда для исследования углеродных квантовых точек при комнатных и пониженных температурах. 2. Освоение методов квантово-химического моделирования электронной структуры наноматериалов, изучение особенностей распределения атомов фтора на поверхности графена, исследование оптических свойств фторированного графена и графита с разными степенями фторирования и особенностей взаимодействия с интеркалированными молекулами. 3. Исследование влияния химической модификации (внедрение азота, галогенирование, окисление) на состав и электронное строение углеродных наноматериалов (нанотрубки, пористый углерод, графеновые материалы) перспективных для электрохимических приложений. Использование экспериментальных методов ультрамягкой рентгеновской и рентгеноэлектронной спектроскопии. Поведение квантово-химических расчетов для интерпретации экспериментальных данных.
Институт катализа СО РАН (пр. ак. Лаврентьева, 5); http://catalysis.ru/						
21	к.ф.-м.н. Каичев Василий Васильевич	Лаборатория спектральных методов, к. 211 КММ	326 94 56	vyk@catalysis.ru	1. Механизм парциального окисления пропилена на металлических катализаторах: In situ исследование методами колебательной спектроскопии и РФЭС. 2. Активные центры моно- и биметаллических катализаторов на основе Pt и Pd: In situ исследование методами EXAFS и XANES.	1. Эксперименты будут проводиться на новом спектральном комплексе фирмы SPECS. Основной метод исследования - ИК-спектроскопия с модулирующей поляризацией падающего излучения, который позволяет одновременно получать спектр адсорбированных частиц и спектр молекул в газовой фазе. Дополнительные методы - рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия и температурно-программируемая десорбция. Модельный катализатор - монокристалл Ag(111). 2. Методами спектроскопии рентгеновского поглощения (EXAFS и XANES) будет исследовано химическое состояние и локальная структура платины и палладия в моно- и биметаллических катализаторах окисления метана. Эксперименты будут проводиться в международных центрах СИ-ИЯФ СО РАН, Курчатовский институт, DESY. Обработка данных, в том числе моделирование EXAFS спектров, будет проводиться с помощью стандартного программного обеспечения ATHENA, ARTEMIS, FEFF 6.
22	к.ф.-м.н. Колоколов Даниил Игоревич	Группа ЯМР спектроскопии каталитических превращений углеводородов	8 913 906 37 69	daniil.kolokolov@gmail.com	1. Исследование молекулярной подвижности гостей молеку в металл-органическом каркасе UiO-66 методами 2H ЯМР спектроскопии твердого тела. 2. Структурная динамика металл-органических каркасов как функция строения каркаса и концентрации гостей молекул.	Экспериментальное исследование молекулярной подвижности ряда гостей молекул (углеводородов) и их смесей в перспективных микропористых сорбентах - сверхстабильных металл-органических каркасах (UiO-66/MIL-140...). Также предполагается изучение структурной подвижности данных каркасов в зависимости от их строения, степени дефектности и наличия гостей молекул. Основным методом выступает ЯМР спектроскопии на ядрах дейтерия (2H ЯМР). Основная цель - понять механизм селективного разделения молекулярных смесей для энергоэффективной очистки ценных продуктов химической переработки сырья. С фундаментальной точки зрения задача состоит в определении механизмов взаимодействия гостей молекул с пористым носителем в условиях ограниченного размера пор (взаимодействие гость-хозяин). Предполагается также использование других методов изучения молекулярной динамики, в том числе в рамках международного сотрудничества.
23	к.ф.-м.н. Якушкин Станислав Сергеевич	Лаборатория исследования процессов в средах повышенной плотности	8 923 249 26 55	stas-yk@catalysis.ru	Изучение начальных стадий образования и эволюции активных центров катализаторов методами электронного магнитного резонанса (ЭПР и ФМР) in situ, в том числе при повышенных температурах и давлениях.	Исследование при помощи метода электронного магнитного резонанса (ЭМР) гетерогенных катализаторов и каталитических систем (Ni-катализаторы гидрирования и переноса водорода, железистоокисные катализаторы, композиты на основе металлоорганических полимеров и др.). Часто и синтез катализатора и каталитические реакции происходят при высоких температурах и давлениях. Поэтому метод ЭМР используется в режиме in situ — измерения проводятся непосредственно в процессе реакции.