

Руководитель	Лаборатория	Комната	Телефон	E-mail	Ориентировочная тема работы	Описание
Бакланов Алексей Васильевич , д.х.н.	Молекулярной фотодинамики	ИХКГ, 303	330 76 23	baklanov@kinetics.nsc.ru	1. Супрамолекулярные фотохимические процессы в слабосвязанных молекулярных комплексах. Экспериментальное изучение с помощью техники визуализации карт скоростей фотофрагментов. 2. Необычная кинетика термоинактивации белковых молекул. Теоретическое исследование.	
Боровков Всеволод Игоревич , д.ф.-м.н., профессор РАН	Быстропротекающих процессов	ИХКГ, 122	330 97 92	borovkov@kinetics.nsc.ru	1. Исследование первичных катион-радикалов в поликристаллических материалах. 2. Исследование бимолекулярных реакций переноса электрона на молекулы. 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 внутритрековых процессов. После знакомства с основами экспериментальных и теоретических подходов возможно расширение тематики (например, исследование первичных поляронных пар в сопряженных полимерах и т.п.).
Валиулин Сергей Владимирович , к.х.н.	Наночастиц	ИХКГ, 107	333 20 44 333 32 44	valiulin@kinetics.nsc.ru	1. Исследование механизмов образования нано- и субмикронных частиц. 2. Разработка и исследование новых неинвазивных способов доставки лекарственных средств. 3. Исследование фармакокинетики лекарственных средств.	
Глазачев Юрий Иванович , к.ф.-м.н.	Химии и физики свободных радикалов	ИХКГ, 105	333-22-94, 8-923-171-1225	glaza@kinetics.nsc.ru	Развитие ЭПР томографии высокого разрешения малых биологических объектов - ЭПР in vivo.	Стабильные нитрокислородные радикалы широко используются для изучения биологически значимых физико-химических параметров биологических систем. Особый интерес представляет изучение пространственного распределения данных параметров (в частности, кислорода и pH) с применением данных зондов в небольших объектах (ЭПР томография). Основная задача в применении данного метода, получение достаточно хорошего пространственного разрешения при разумном времени записи данных (спектров).
Глебов Евгений Михайлович , д.ф.-м.н.	Фотохимии	ИХКГ, 313	8 923 125 4644	glebov@kinetics.nsc.ru	1. Исследование первичных фотофизических и фотохимических процессов для комплексов платиновых металлов, перспективных для применения в фотохимиотерапии. 2. Исследование фотопереключаемой люминесценции диарилэтанов: от фундаментальных процессов - к оптической памяти.	Мы исследуем первичные фотофизические и фотохимические процессы для разных химических объектов на основе регистрации и идентификации короткоживущих промежуточных частиц. Временной диапазон - от поглощения светового кванта до образования конечных продуктов.
Дзюба Сергей Андреевич , д.ф.-м.н., профессор Сырямина Виктория Николаевна , к.ф.-м.н.	Химии и физики свободных радикалов	ИХКГ, 338, 222	333-12-76	dzuba@kinetics.nsc.ru , syryamina@gmail.com	Биофизика мембран - исследование методом импульсного электронного парамагнитного резонанса спиновых меток	Импульсный электронный парамагнитный резонанс (ЭПР) спиновых меток является эффективным методом изучения наноструктуры биологических систем (мембраны, белки, ДНК и другие). В частности, импульсный ЭПР позволяет выявлять формирование в мембранах кластеров молекул. Одной из задач является изучение молекулярных механизмов действия антимикробных пептидов - перспективных антибиотиков нового типа - на модельные бактериальные мембраны.
Замашиков Валерий Владимирович , д.ф.-м.н.	Физики и химии горения газов	ИХКГ, эксп. корпус, 19	333-22-96	albor@kinetics.nsc.ru	Определение характеристик волны горения при повышенных давлениях.	В закрытых сосудах при наличии горючего газа или смеси частиц топлива с окислителем возможно горение. При этом распространение пламени происходит при переменном давлении и температуре. Изучение такого процесса имеет большое практическое значение.

Руководитель	Лаборатория	Комната	Телефон	E-mail	Ориентировочная тема работы	Описание
Карасев Владимир Васильевич , к.ф.-м.н.	Горения конденсированных систем	ИХКГ, 302		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 характеристик 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» nanoоксидного дыма и генерация в стратосфере с помощью перспективных экологических ракет с гибридным двигателем: горючее-металлический порошок, окислитель – забортный кислород.
Князьков Денис Анатольевич , к.ф.-м.н. Шмаков Андрей Геннадьевич , д.х.н. Герасимов Илья Евгеньевич , к.ф.-м.н.	Кинетики процессов горения	ИХКГ, эксп. корпус	333 33 46	daknyazkov@gmail.com shmakov@kinetics.nsc.ru gerasimov@kinetics.nsc.ru	1. Образование заряженных частиц при горении: масс-спектрометрическое и численное исследование. 2. Исследование химической структуры пламен жидких топлив при повышенных давлениях. 3. Холодные пламена: экспериментальное и численное исследование химии горения.	1. Как известно, в пламени в результате реакций хемионизации образуются заряженные частицы. Хотя их концентрация гораздо меньше (на 2-4 порядка величины), чем концентрация самых немногочисленных нейтральных интермедиатов в пламени, они относительно легко поддаются детектированию методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии (МПМС). Знание механизма образования катионов и анионов в пламени открывает широкий спектр возможностей для контроля и диагностики процессов горения. Это вызывает особый интерес в последнее время в связи с необходимостью создания новых сверхчувствительных методов мониторинга состава продуктов горения. В работе предстоит измерять катионы в разнообразных пламенах с помощью МПМС-установки Hiden HPR-60 MBMS; проводить численное моделирование катионной структуры пламен. Особо увлеченным данной тематикой будет представлена возможность проведения квантово-химических расчетов термодинамических свойств катионов. 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. Большой интерес к "холодному" горению обусловлен значимостью таких процессов для явлений самовоспламенения и зажигания. Задачи: сконструировать горелку для стабилизации холодных пламен; измерить их химическую структуру методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии; провести численное моделирование кинетики протекающих реакций.
Коробейничев Олег Павлович , д.ф.-м.н., профессор Палецкий Александр Анатольевич , д.ф.-м.н.	Кинетики процессов горения	ИХКГ, эксп. корпус, 30, 16	3332852 3333346	korobein@kinetics.nsc.ru paletsky@kinetics.nsc.ru	1. 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.	1. 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.

Руководитель	Лаборатория	Комната	Телефон	E-mail	Ориентировочная тема работы	Описание
Кулик Леонид Викторович , д.ф.-м.н., профессор РАН	Химии и физики свободных радикалов	ИХКГ, 205	8-913-773-1376	chemphy@kinetics.nsc.ru	1. Кинетика светоиндуцированного разделения зарядов в активной среде органических фотовольтаических ячеек по данным импульсного ЭПР с лазерным возбуждением 2. Разработка новой архитектуры органических фотовольтаических ячеек с использованием углеродных нанотрубок.	1. Ключевой интермедиат фотоэлектрического преобразования в органических донорно-акцепторных композитах - электрон и дырка, образовавшиеся при переносе заряда из возбужденного состояния, связанные кулоновским притяжением (так называемое состояние с переносом заряда). Поскольку полный электронный спин при быстром переносе электрона сохраняется, данное состояние является спин-коррелированным. Это дает возможность применять продвинутые методы импульсного ЭПР и регистрировать необычные сигналы электронного спинового эхо. Моделирование данных сигналов позволяет определить расстояние между электроном и дыркой в нанометровом диапазоне и его изменение на микросекундном масштабе времени, то есть проследить кинетику разделения светоиндуцированных зарядов. Планируется исследовать эти эффекты в высокоэффективных композитах, используемых в современной органической фотовольтаике. Имеется сотрудничество с Харбинским Институтом Технологии (Китай) в области использования современных акцепторов электрона. 2. Ковалентно функционализированные углеродные нанотрубки позволяют модифицировать электроды, делая их из плоских - трехмерными, и таким образом увеличивать КПД органических фотовольтаических ячеек. Планируется исследовать возможности применения для этой цели нанотрубок, к которым ковалентно присоединены различные функциональные группы.
Мальцев Валерий Павлович , д.ф.-м.н., профессор	Цитометрии и биокинетики	ИХКГ, 111 корпус-модуль	333 32 40	maltsev@kinetics.nsc.ru	1. Исследование агрегации тромбоцитов, индуцированной коллагеном. 2. Определение содержания гликированного гемоглобина в эритроцитах по сигналам светорассеяния. 3. Разработка бесфлюорисцентного способа дифференциации лейкоцитарных клеток. 4. Исследование морфологических и функциональных характеристик эритроцитов в изотонических средах различной кислотности.	Все представленные работы предполагают исследование клеток крови участвующих в важнейших функциях организма человека. 1. Исследование предполагает измерение кинетики агрегации тромбоцитов под воздействием коллагена, с последующим построением математической модели процесса. Работа актуальна для исследования больных с нарушениями тромбоцитарного звена гемостаза. 2. Предполагается, что в рамках работы будет создан метод определения содержания гликированного гемоглобина в эритроцитах в формате общего анализа крови. Работа актуальна для исследования больных сахарным диабетом. 3. Работа является первым шагом в разработке методов иммунотипирования лейкоцитарных клеток без использования моноклональных антител. Похожие подходы уже были реализованы командой лаборатории для эритроцитов и тромбоцитов. Успешная реализации работы позволит подробно изучать морфологию различных типов лейкоцитарных клеток, а также физиологические процессы, происходящие с этими клетками. 4. Работа предполагает изучение динамики изменения формы эритроцитов в изотонических средах различной кислотности с последующим построением молекулярно-кинетической модели происходящего процесса. Работа актуальна для дальнейшего изучения процесса CO ₂ /O ₂ обмена в эритроцитах.
Медведев Николай Николаевич , д.ф.-м.н.	Молекулярной динамики и структуры	ИХКГ, 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.

Руководитель	Лаборатория	Комната	Телефон	E-mail	Ориентировочная тема работы	Описание
Михейлис Александр Викторович	Фотохимии	ИХКГ, 313	333-23-85	mikheyлис@kinetics.nsc.ru	Исследование реакций присоединения Se- и S-центрированных органических радикалов к комплексам ионов переходных металлов	Органические радикалы – короткоживущие, однако весьма активные интермедиаты, способные вступать во взаимодействие с различными промежуточными частицами или молекулами. Интересным явлением здесь можно назвать реакции их координации к различным металлокомплексам. Было обнаружено, что зачастую внедрение радикалов в координационную сферу комплексообразователя приводит к формированию интермедиатов – радикальных комплексов, имеющих отличные от предшественников спектральные характеристики и более длинные времена жизни. Интересно также и то, что механизмы исчезновения таких интермедиатов весьма разнообразны и могут складываться за счет процессов диссоциации, рекомбинации или образования более сложных частиц (димеров). Процессы обратимой координации лежат в основе фотохромных превращений, обнаруженных нами для некоторых молекулярных систем типа «селен-/сераорганические соединения (источник радикалов) + комплексы переходных металлов». Данная область в настоящее время представляется привлекательной с точки зрения практической значимости работы и перспектив ее развития. Целью дальнейших наших исследований является разработка и совершенствование подобных систем с фотохромными свойствами, определение механизмов их фотопревращений с привлечением методов стационарного и наносекундного лазерного импульсного фотолиза. Студенты бакалавриата/специалитета, желающие принять участие в развитии тематики, а также познакомиться с новыми методами, приглашаются присоединиться к исследованиям для выполнения дипломной работы.
Поздняков Иван Павлович, к.х.н.	Фотохимии	ИХКГ, 13	333 23 85 8 913 776 09 01	ipozdnyak@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.
Уваров Михаил Николаевич, к.ф.-м.н.	Химии и физики свободных радикалов	ИХКГ, 223	333 13 77	uvarov@kinetics.nsc.ru	Оптические и фотолюминесцентные свойства новых поликонденсированных гетероциклических соединений	Поликонденсированные гетероциклические соединения являются перспективными люминесцирующими материалами для их применения в различных наукоёмких технологиях. Известно, что люминесцентные и оптические свойства таких соединений могут весьма сильно зависеть не только от химической структуры люминофоров и их заместителей, но также от параметров облучающего света, полярности окружающих молекул, наличия комплексов молекул люминофоров и их структуры. В ИХКГ СО РАН были впервые синтезированы и выделены новые гетероциклические соединения, такие как диаза- замещённые и тетрааза-замещённые аналоги периленов и бензопиренов, а также производные на основе антрациофенов и антрабитиофенов. Поэтому весьма важной задачей является исследование люминесцентных свойств новых соединений с целью определения областей применения, в которых новые синтезированные соединения могут быть использованы для улучшения существующих характеристик люминесцирующих материалов в различных приложениях. Выявление сольватохромных свойств растворов новых соединений необходимо для определения возможностей их применения в качестве флуоресцирующих сенсоров ионов в растворах. Исследования агрегатов и наночастиц молекул в растворах необходимы для определения возможности их применения в качестве флуоресцирующих зондов в медицине. Фото- и электро- люминесцентные свойства новых материалов, находящихся в виде тонких плёнок, представляют практический интерес для применения новых люминофоров в органических светодиодах.

Руководитель	Лаборатория	Комната	Телефон	E-mail	Ориентировочная тема работы	Описание
Черемисин Александр Алексеевич, д.ф.-м.н., профессор	Дисперсных систем	ИХКГ, 318	333 07 87	cheremisin@kinetics.nsc.ru	<p>1. Развитие теории гравитофотофореза аэрозольных частиц и кластеров на основе численных экспериментов с использованием алгоритмов Монте-Карло.</p> <p>2. Моделирование стохастической динамики кластерных аэрозолей в разреженных газах при фотофорезе на основе алгоритмов Монте-Карло.</p> <p>3. Влияние фотофореза на перенос и стратификацию аэрозоля в средней атмосфере.</p>	<p>Общая тематика: перенос аэрозольных частиц и кластеров в разреженных газах и плазме при наличии внешних полей и излучений.</p> <p>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).</p> <p>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.</p> <p>3. Участие в проведении исследования переноса аэрозоля в средней атмосфере (от вулканов, пирокумулятивные облака в стратосфере, полярные стратосферных 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).</p>
Яньшолё Вадим Владимирович, к.ф.-м.н.	Лаборатория протеомики и метаболомики	МТЦ СО РАН, 123	330-31-36	vadim.yanshole@tomo.nsc.ru	<p>1. Метаболомный анализ биологических тканей и жидкостей от пациентов с заболеваниями (диабетическими язвами, лимфедемой, катарактой и др.) с целью установить биомаркеры заболеваний или установить молекулярные механизмы их возникновения</p> <p>2. Анализ метаболома биологических тканей позвоночных животных</p> <p>3. Разработка нового метода обработки метаболомных ЯМР (ВЭЖХ-МС) данных с применением нейросетей</p>	<p>Работы в лаборатории связаны с исследованиями в области метаболомики – одной из самых молодых и бурно развивающихся отраслей пост-геномных наук. Метаболомика изучает малые (до ~1000 Дальтон) биологические молекулы в тканях и жидкостях человека и животных с помощью физико-химических методов – ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием (ВЭЖХ-МС). Важной частью работ также является применение и развитие статистических методов анализа «больших» данных и развитие сервера (базы данных) с результатами исследований.</p> <p>Ещё одно направление работ связано с развитием методов поиска сигналов в исходных ВЭЖХ-МС и ЯМР данных, основанных на нейросетях глубокого обучения. Результаты работ носят как фундаментальный, так и прикладной характер в области химических, биологических и медицинских исследований: механизмы возникновения ряда заболеваний человека, описание новых биологических молекул, эволюционные и экологические исследования.</p>