

## **ПРОФИЛЬ ПОДГОТОВКИ «МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ФАЗ»**

### **Тема 1. Разработка алгоритмов виртуальной оптики для визуализации вирусных частиц по картине дифракции когерентного синхротронного излучения**

Когерентная дифракционная визуализация является быстро развивающейся формой микроскопии без линз. В результате дифракции когерентного синхротронного излучения на вирусной частице и вирусных молекулах в плоскости детектора формируется фурье-образ вирусной частицы - интерференционная картина, в которой сохранена информация о фазе рассеянной волны. Используя обратное фурье-преобразование и передовые вычислительные методы, эту дифракционную картину можно инвертировать, чтобы получить изображение вируса и его молекул. Для получения высокого разрешения вирусных частиц или вирусных белков на атомарном уровне необходимо использовать высокие дозы рентгеновского излучения. В работе планируется освоение имеющихся и разработка новых алгоритмов для восстановления изображения вирусных белковых молекул по картине когерентной дифракции на (1) кристаллах из этих молекул, (2) отдельных вирусных частицах, состоящих из этих молекул.

Руководители: к.б.н., с.н.с. Рыжиков Александр Борисович, ГНЦ ВБ "Вектор", к.х.н. С.Г. Архипов, ИК им. Г.К. Борескова

Место практики: ГНЦ ВБ "Вектор", ИК им. Г.К. Борескова, НГУ

### **Тема 2. Разработка технологии кристаллизации вирусных белков для ультраструктурных исследований с помощью источника когерентного синхротронного излучения**

Оболочечные белки вирусов отвечают за связывание вирусов с клеткой-мишенью и слияние вирусных и клеточных мембран для доставки вирусного генетического материала внутрь инфицируемой клетки. Знание структуры вирусных белков важно как для понимания механизма проникновения вируса в клетку, так и для разработки лекарственных препаратов против вирусов. Рентгеноструктурный анализ белковых молекул проводится на кристаллах из этих молекул. В работе планируется освоение методов выращивания кристаллов из белковых молекул, включая оболочечные вирусные белки, и проведение рентгеноструктурного исследования полученных кристаллов.

Руководители: к.б.н., с.н.с. Рыжиков Александр Борисович, ГНЦ ВБ "Вектор", к.х.н. С.Г. Архипов, ИК им. Г.К. Борескова

Место практики: ГНЦ ВБ "Вектор", ИК им. Г.К. Борескова, НГУ

### **Тема 3. Разработка технологии аэрозольных инжекторов вирусных частиц для доставки образца в счетный объем источника когерентного синхротронного излучения**

Конформационные переходы оболочечных вирусных белков происходят при определенных физиологических условиях на этапах проникновения вируса в клетку или выхода созревших вирионов из зараженной клетки. Общепринятый метод рентгеноструктурного анализа кристаллов белковых молекул не применим для исследования конформационного перехода вирусных белков в физиологических растворах. Для этого необходимо разработать методы дифракции пучка на

одиночной вирусной частице, находящейся внутри аэрозольной частицы. В работе планируется освоение методов работы и создание инъекционных аэрозольных систем для доставки аэрозольных частиц, содержащих вирусные частицы, в счетный объем пучка синхротронного излучения. Вместо вирусных частиц в модельных экспериментах будут использованы латексные частицы размером 50-200 нм.

Руководители: к.б.н., с.н.с. Рыжиков Александр Борисович, ГНЦ ВБ "Вектор", к.х.н. С.Г. Архипов, ИК им. Г.К. Борескова

Место практики: ГНЦ ВБ "Вектор", ИК им. Г.К. Борескова, НГУ

#### **Тема 4. Проект экспериментальной станции для дифракционных исследований ЦКП «СКИФ»**

Решаемая научная задача: Подбор и расчет оптической схемы станции, обеспечивающей оптимальное использование возможностей источника синхротронного излучения (СИ) 4-го поколения для реализации дифракционных методов исследования образцов, в том числе в переменных Р,Т-условиях и различных газовых средах. В рамках работы будут выполнены эксперименты на источнике СИ ВЭПП-3, направленные на определение дифракционных характеристик алмазов отечественного производства, потенциально применимых для монохроматизации пучков СИ.

Научные руководители: канд. хим. наук Б.А. Захаров, канд. физ.-мат. наук Я.В. Ракшун

Место практики: ИК им. Г.К. Борескова СО РАН, ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН

#### **Тема 5. Расчет оптических элементов дифракционных станций источника СИ СКИФ**

В соответствии с поручением Президента Российской Федерации в г. Новосибирске планируется создание современной исследовательской инфраструктуры на основе источника синхротронного излучения 4-го поколения СКИФ (Сибирский Кольцевой Источник Фотонов). Проект СКИФ является пилотным проектом по созданию отечественной сети источников СИ с головной машиной в НИЦ «Курчатовский институт». Реализация проекта позволит на десятилетия обеспечить Сибирский регион высокопроизводительной инфраструктурой для решения актуальных задач материаловедения (включая технологии двойного назначения), биологии и медицины, создать условия для проведения исследований и разработок, соответствующие передовым принципам организации научной и инновационной деятельности. Центр коллективного пользования на основе источника СИ СКИФ позволит сконцентрировать, закрепить и развить региональные интеллектуальные и инфраструктурные ресурсы для обеспечения выхода российских научных, образовательных организаций и производственных компаний на глобальные рынки знаний и технологий.

Проект СКИФ включает в себя создание собственно источника СИ с энергией электронов 3 ГэВ, током пучка 400 мА и периметром накопителя 480 м, сопутствующих лабораторий различного

профиля и пользовательских экспериментальных станций. Экспериментальной станцией считается канал вывода СИ от фронтэнда экспериментального зала до непосредственно экспериментальной исследовательской установки. Станция включает в себя элементы рентгеновской оптики, монохроматор и систему детектирования рассеянного образцом излучения. Расчет оптических элементов канала СИ – рефракционных линз, сплиттеров, монохроматоров, зеркал полного внешнего отражения, коллиматоров – с использованием имеющегося в свободном доступе программного обеспечения составляет предмет предлагаемой дипломной работы. Ожидаемым результатом является полностью оптимизированная оптическая схема ондуляторного канала станции «Структурная Диагностика».

Научный руководитель: д.х.н. А.Н. Шмаков

Место практики: ИК им. Г.К. Борескова СО РАН

#### **Тема 6. Расчет оптической схемы станции "Быстропротекающие процессы" ЦКП "СКИФ"**

Научный руководитель: Рубцов Иван Андреевич, м.т. +7 913 794 2800, р.т. 333 32 49, e-mail: rubtsov@hydro.nsc.ru

Место практики: ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН

#### **Тема 7. Построение уравнения состояния продуктов детонации конденсированных взрывчатых материалов**

Научный руководитель: Рубцов Иван Андреевич, м.т. +7 913 794 2800, р.т. 333 32 49, e-mail: rubtsov@hydro.nsc.ru

Место практики: ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН

#### **Тема 8. Изучение разрушения поверхности металлов при воздействии интенсивных ударных волн**

Научный руководитель: Рубцов Иван Андреевич, м.т. +7 913 794 2800, р.т. 333 32 49, e-mail: rubtsov@hydro.nsc.ru

Место практики: ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН

#### **Тема 9. Исследование модификации кристаллической структуры вольфрама при облучении потоком плазмы**

Научный руководитель: к.ф.-м.н. Аракчеев Алексей Сергеевич, р.т. 329 47 99, e-mail: A.S.Arakcheev@inp.nsk.su

Место практики: ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН

## **Тема 10. Особенности структуры фотокатализаторов и их эволюция в ходе фотокаталитических процессов**

Научный руководитель: д.х.н. А.Н. Шмаков, д.х.н. Д.В. Козлов

Место практики: ИК им. Г.К. Борескова СО РАН

## **Тема 11. Структурные трансформации электродов электрохимических ячеек в условиях целевого процесса**

Актуальность исследований, направленных на поиск новых способов получения энергии, а также повышения эффективности существующих источников энергии не вызывает сомнений.

Сокращение ископаемых энергетических ресурсов и проблемы экологии стимулируют возрастающий интерес к возобновляемым источникам энергии. В данном контексте особое место занимают топливные элементы (ТЭ) и, в частности, низкотемпературные водородные топливные элементы с твёрдым протон-проводящим электролитом (ТЭТПЭ). Данные устройства могут найти применение в качестве стационарных и мобильных источников питания, а также стать альтернативой двигателям внутреннего сгорания в транспортных средствах.

Топливный элемент представляет собой электрохимическое устройство, основанное на прямой конверсии химической энергии топлива в электричество. В зависимости от условий функционирования выделяют пять основных типов ТЭ: ТЭТПЭ, щелочные ТЭ, ТЭ на основе ортофосфорной кислоты, ТЭ на основе расплавленного карбоната, твердооксидные ТЭ [3].

Для функционирования ТЭТПЭ необходимо использование электрокатализаторов, основным компонентом которых в настоящее время является платина. Ввиду замедленной кинетики реакции электрокаталитического восстановления кислорода (РВК), протекающей на катоде ТЭТПЭ, содержание дорогостоящей платины в составе каталитических слоёв ТЭТПЭ довольно высоко. Последнее является одной из ключевых проблем, которые стоят на пути к широкому распространению этой технологии.

Для разработки более эффективных и доступных электрокатализаторов необходимо тщательное исследование кинетики РВК. Для этого используется ряд стандартных динамических и статических методов исследования, в которых значение потенциала (тока) изменяется с постоянной скоростью или остается неизменным соответственно. При этом использование метода спектроскопии электрохимического импеданса позволяет получить дополнительную информацию о протекающих на поверхности катализатора процессах с переносом заряда и структуре двойного электрического слоя.

Зачастую данный метод является основным при изучении сложных гетерогенных систем с наличием фазовых границ и развитой структурой поверхности, содержащей микро- и мезопоры и различные дефекты. Поэтому значительный интерес представляет изменение фазового состава и

структуры электродов ТЭ в процессе работы. Такую информацию можно получить с использованием метода рентгеновской дифракции в жестком диапазоне энергий фотонов. Совместное использование методов электрохимического импеданса и рентгенофазового анализа позволяет проводить исследование в режиме In Situ.

В отличие от традиционных химических источников тока, в ТЭПЭ топливо и окислитель подаются извне. Кислород подаётся на катод либо в чистом виде, либо в составе очищенного воздуха. Водород высокой чистоты подают на анод, на котором происходит реакция окисления водорода с образованием 2 протонов и 2 электронов. Протоны движутся сквозь мембрану к катоду, в то время как электроны движутся к катоду по внешней цепи, генерируя тем самым электрический ток. На катоде электроны рекомбинируют с протонами и в реакции с кислородом образуют воду, которая в виде единственного побочного продукта реакции выводится из ТЭ. Общая реакция ТЭ, представляющая собой сумму реакций, протекающих на аноде и катоде, выглядит следующим образом:  $\text{H}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$  ( $E_0 \text{ ТЭ} = 1.229 \text{ В}$ ). Величина 1.229 В (при стандартных условиях) является термодинамически предельно допустимой ЭДС процесса, которая недостижима на практике ввиду следующих факторов, определяющих потери напряжения в ТЭПЭ: 1) замедленная кинетика РВК, так называемое катодное перенапряжение; 2) омические потери, вследствие электрического сопротивления на контактах между биполярными пластинами и газодиффузионными слоями, а также за счет омического сопротивления транспорта протонов через мембрану; 3) концентрационные потери, обусловленные затрудненным транспортом  $\text{O}_2$  через диффузионную среду и приэлектродный слой к активному компоненту катодного катализатора.

С точки зрения разработки и исследования катализаторов ТЭПЭ наиболее информативными каталитическими тестами являются исследования, проводимые непосредственно на макете топливного элемента. Однако измеряемые в ТЭ  $I-E$  характеристики оказываются зависимыми не только от свойств активного компонента исследуемого катализатора, но и от перечисленных выше факторов. Поэтому для изучения непосредственно каталитической активности платиновых частиц, исключая влияние посторонних факторов, проводятся эксперименты в электрохимической ячейке с жидким электролитом. В данном случае возможно селективное изучение процессов, протекающих либо на катоде, либо на аноде ТЭ, путем насыщения рабочего электролита кислородом или водородом соответственно. При этом измерения проводятся с использованием тонкого слоя катализатора на поверхности проводящего материала, что позволяет минимизировать влияние процессов диффузии реагентов и продуктов.

Предлагаемая дипломная работа состоит в проведении исследования состояния электродов ТЭ в режиме In Situ с одновременным измерением электрохимического импеданса.

Место практики: ИК им. Г.К. Борескова СО РАН

### **Тема 12. Структурные аспекты кислородного транспорта в оксидах редкоземельных элементов**

Предлагаемая работа имеет целью диагностику пространственной и электронной структуры и физико-химических свойств материалов на основе сложных оксидов. Исследуемые материалы обладают смешанной ионно-электронной проводимостью, причем возможна как кислородная, так и протонная проводимость. Особый интерес представляет связь транспортных свойств материала с его пространственной и электронной структурой при различных температурах в условиях реакционной среды. Исследуемые материалы могут быть использованы в устройствах генерации электроэнергии, каталитических окислительных реакторах, устройствах получения водорода из углеводородного сырья. Такие устройства позволят перерабатывать углеводородные топлива с высокой эффективностью и малым влиянием на окружающую среду по сравнению с широко используемыми технологиями.

Объектами исследования в предлагаемой работе будут:

- 1) сложные оксиды церия-циркония с флюоритоподобной структурой, допированные редкоземельными элементами;
- 2) сложные оксиды редкоземельных элементов с перовскитоподобной структурой, относящиеся к гомологическому ряду фаз Раддлесдена-Поппера;
- 3) вольфраматы редкоземельных элементов как потенциальные протонные проводники.

Целью предлагаемой дипломной работы будет структурная диагностика материалов на синхротронном излучении в нормальных условиях и в условиях высоких температур и реакционных сред. Для достижения поставленной цели необходимо будет решить задачи, связанные с исследованием атомной структуры и структурных трансформаций с учетом размеров нанодоменов и свойств доменных границ в зависимости от параметров внешней среды. Дополнительно предполагается проведение исследований ионного транспорта рядом независимых физико-химических методов, включая метод изотопного обмена и метод релаксации объема элементарной ячейки по данным рентгеновской дифракции In Situ.

Научный руководитель: д.х.н. А.Н. Шмаков

Место практики: ИК им. Г.К. Борескова СО РАН

### **Тема 13. Структурные превращения катализаторов в условиях сверхкритических сред**

Из курса молекулярной физики известно, что при некоторых давлении и температуре исчезает различие между жидкой и газообразной фазами – вещество переходит в состояние, называемое критическим. На P–T-диаграмме это состояние обозначается точкой, которой оканчивается линия равновесия «газ-жидкость». Область выше и правее критической точки называется сверхкритической областью. Вещество в сверхкритической области часто называют сверхкритическим флюидом (СКФ).

В критическом и сверхкритическом состоянии свойства вещества существенно отличаются от свойств того же вещества в жидком или газообразном состоянии. В частности, резко изменяется реакционная способность вещества – например, такие относительно инертные среды как углекислый газ или вода в сверхкритическом состоянии становятся весьма агрессивными. Кроме того, изменяется пространственная структура сверхкритической среды. По сравнению с традиционными жидкостями-растворителями СКФ характеризуются значительным ослаблением межмолекулярных связей, имеют большую сжимаемость, меньшую плотность и, соответственно, больший свободный объем, доступный для молекул. Это приводит к тому, что уже небольшие по величине силы притяжения перемещают молекулы и ионы в энергетически более выгодное положение, приводя к неоднородному пространственному распределению молекул растворителя вокруг растворенных молекул. В результате система обретает пространственно-неоднородную плотность, изменённый характер межмолекулярных взаимодействий, но остаётся энергетически минимизированной с точки зрения суперпозиции энергетических характеристик. Указанный феномен, описываемый часто в терминах увеличения локальной плотности или кластеризации, приводит к эффектам, которые не свойственны для жидкостей в обычных (традиционных) условиях жидкофазных реакций.

Благодаря сольватационным эффектам и высокой изотермической сжимаемости парциальный молярный реакционный объем при переходе в СК состояние может претерпевать резкие (более чем на порядок) изменения. Изменение характеристик активационных параметров химической реакции, в конечном счете, влияет на скорость и селективность химических процессов. Важно, чтобы эти изменения по сравнению с исходным энергетическим состоянием на координате реакции оказывали нужный эффект и приводили к значительному сдвигу термодинамического равновесия реакции в нужную сторону.

Предлагаемая дипломная работа подразумевает проведение сравнительного исследования строения и свойств гетерогенных катализаторов на основе соединений Fe, Co и Ni в ходе их взаимодействия с реакционной средой, находящейся в сверхкритическом (СК) состоянии, с учетом особенностей микроструктуры сверхкритических флюидов (СКФ) (сольватационных свойств, эффектов кластеризации, изменения локальной концентрации и плотности) вблизи твердой поверхности катализаторов.

Конкретная фундаментальная задача заключается в экспериментальном исследовании состояния гетерогенных катализаторов на основе наночастиц оксидов железа  $Fe_2O_3$  и  $Fe_3O_4$ , кобальта и нанесенных систем  $Ni-Cu/Al_2O_3-SiO_2$  в ходе каталитических реакций при повышенных температурах и давлениях в режиме In Situ при их взаимодействии со сверхкритическими флюидами, в частности – низшими спиртами, находящимися в СК состоянии. Методами рентгеновской дифракции в жестком диапазоне энергий фотонов, электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) и инфракрасной Фурье-спектроскопии (ИК-Фурье) в режиме In Situ предполагается изучить эволюцию фазового состава катализаторов, эффекты флуктуации локальной плотности среды и причины концентрационных неоднородностей на примере реакций гидрирования/дегидрирования с участием низших спиртов.

Научный руководитель: д.х.н. А.Н. Шмаков

Место практики: ИК им. Г.К. Борескова СО РАН

#### **Тема 14. Развитие и применение метода EXAFS для исследования строения катализаторов на основе оксидов переходных металлов**

Целью работы является изучение структуры и химического строения оксидных катализаторов на основе переходных металлов методами спектроскопии рентгеновского поглощения. Экспериментальная часть работы будет проводиться в центрах синхротронного излучения КИСИ (НИЦ Курчатовский институт, Москва) и СЦСТИ (ИЯФ СО РАН, Новосибирск). Планируется проводить как рутинные исследования катализаторов методами EXAFS и XANES, так и in situ исследования катализаторов в условиях протекания каталитических реакций – окисления CO и углеводородов. Особое внимание будет уделяться обработке спектров рентгеновского поглощения, в том числе моделированию EXAFS спектров с целью уточнения структуры оксидов переходных металлов. Полученные навыки позволят продолжить исследования катализаторов в строящемся центре синхротронного излучения СКИФ (Новосибирск).

Научный руководитель: к.ф.-м.н. В.В. Каичев

Место практики: ИК им. Г.К. Борескова СО РАН

#### **Тема 15. Дифракционные исследования композиционных материалов полученных методом электронно лучевой обработки**

Научный руководитель: к.х.н. Анчаров Алексей Игоревич, e-mail: ancharov@mail.ru

Место практики: ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН, ИХТТМ СО РАН

#### **Тема 16. Дифракционные исследования и получение высокотемпературных карбидов Hf, Ta, W методом лазерной обработки**



Научный руководитель: к.х.н. Анчаров Алексей Игоревич, e-mail: ancharov@mail.ru  
Место практики: ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН, ИХТТМ СО РАН

**Тема 17. Изучение методом МУРР характера взаимодействия прекурсора Pt наночастиц с поверхностью носителей**

Научный руководитель: к.х.н. Ю.В. Ларичев,  
Место практики: ИК им. Г.К. Борескова СО РАН, НГУ

**Тема 18: Изучение процесса термического разложения гексабромоиридата аммония в восстановительной и инертной атмосферах методом QXAFS. (Работа на год, бакалавр)**

**Тема 19. Исследование процесса формирования биметаллических частиц методом QXAFS. (2 года, специалист или магистрант)**

**Тема 20. Исследование атомно диспергированных состояний Pt на поверхности малослойного графена. (1 год, можно и более. Позиция для химика)**

**Тема 21. *In operando* XAFS исследование катализаторов  $\{Pt_4O_{16}\}/CeO_2$  в реакциях окисления CO.**

**Тема 22. Исследование электронной структуры малослойных фторидов графена методами рентгеновской спектроскопии. (РФЭС, XANES в мягкой области.)**

**Тема 23. Исследование электронной структуры аминофторидов графита и графена методами рентгеновской спектроскопии. (РФЭС, XANES в мягкой области)**

Научные руководители тем 18 - 23 : к.х.н. Т.И. Асанова или к.ф.-м.н. И.П. Асанов, e-mail: nti@niic.nsc.ru

Место практики ИНХ СО РАН им. А.В. Николаева

Студенты смогут в будущем ездить на эксперименты в международные синхротронные центры Bessyl, PALII, Soleil, ESRF и др.