

Руководитель	Лаборатория	Комната	Телефон	E-mail	Ориентировочная тема работы	Описание
Бакланов Алексей Васильевич , д.х.н. Богомолов Александр Сергеевич , к.ф.-м.н.	Молекулярной фотодинамики	303	330 76 23	baklanov@kinetics.nsc.ru bogomolov@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.	Быстропротекающих процессов	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, используемом для создания ион-радикалов короткими импульсами 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 поляронных пар в сопряженных полимерах и т.п.).
Валиулин Сергей Владимирович , к.х.н. Карасев Владимир Васильевич , к.ф.-м.н.	Наночастиц	107	333 20 44 333 32 44	valiulin@kinetics.nsc.ru karasev@kinetics.nsc.ru	Исследование механизма образования наноаэрозольных форм лекарственных веществ и влияния их физико-химических свойств на биологическую активность.	
Глазачев Юрий Иванович , к.ф.-м.н.	Химии и физики свободных радикалов	105	333 22 94 8 923 171 1225	glaza@kinetics.nsc.ru	Изучение физико-химических свойств стабильных нитрокислородных радикалов применяемых как спиновые зонды для ЭПР in vivo.	Стабильные нитрокислородные радикалы широко используются для изучения биологически значимых физико-химических параметров биологических систем. Данные радикалы синтезируются в НИОХ, с которым идет сотрудничество. Конечная цель поиск радикалов с соответствующими свойствами. В основном используется метод ЭПР. Также используются оптические и биохимические методы.
Глебов Евгений Михайлович , д.ф.-м.н.	Фотохимии	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 фотопереклюаемой люминесценции диарилэтенов: 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. Сырямина Виктория Николаевна , к.ф.-м.н.	Химии и физики свободных радикалов	338 222	333 12 76	dzuba@kinetics.nsc.ru v.syryamina@gmail.com	Исследование холестерин-липидных и пептид-липидных взаимодействий в биологических мембранах методом ЭПР спиновых меток	Импульсный электронный парамагнитный резонанс (ЭПР) спиновых меток является эффективным современным методом изучения наноструктуры и динамики молекул в биологических системах (мембраны, белки, ДНК и другие). Лаборатория ХФСР в этой области занимает передовые позиции в стране и имеет ряд результатов мирового уровня. В дипломной работе указанной тематики предполагается проведение дальнейших исследований в этом направлении.
Докторов Александр Борисович , д.ф.-м.н. Федоренко Станислав Григорьевич	Теоретической химии	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).

<p>Карасев Владимир Васильевич, к.ф.-м.н.</p> <p>Валиулин Сергей Владимирович, к.х.н.</p>	<p>Горения конденсированных систем</p>	<p>302</p>	<p>333 32 44 333 20 44</p>	<p>karasev@kinetics.nsc.ru</p> <p>valiulin@kinetics.nsc.ru</p>	<p>Изучение комплекса параметров фрактальных агрегатов оксидных наносферул – продуктов горения металлических (Al, Ti, Mg) микрочастиц.</p>	<p>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» наноксидного дыма и генерация в стратосфере с помощью перспективных экологических ракет с гибридным двигателем: горючее-металлический порошок, окислитель – забортный кислород.</p>
<p>Князьков Денис Анатольевич, к.ф.-м.н.</p> <p>Шмаков Андрей Геннадьевич, к.х.н.</p> <p>Герасимов Илья Евгеньевич, к.ф.-м.н.</p>	<p>Кинетики процессов горения</p>	<p>Эксп. корпус 30 16 29</p>	<p>333 33 46</p>	<p>daknyazkov@gmail.com</p> <p>shmakov@kinetics.nsc.ru</p> <p>gerasimov@kinetics.nsc.ru</p>	<p>1. Разработка методики определения концентраций промежуточных продуктов горения в пламени по его катионному составу. 2. Исследование химической структуры пламён жидких топлив при повышенных давлениях. 3. Экспериментальное и численное исследование химической структуры холодных пламён.</p>	<p>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 пламёнах другими методами невозможна. 2. Метод МПМС позволяет измерять концентрации важных промежуточных соединений в пламени, включая радикалы. Особый интерес представляют данные о химической структуре пламён при давлениях выше атмосферного. В работе необходимо будет спроектировать камеру и систему подачи топлива высокого давления, исследовать химическую структуру пламён жидких углеводородных топлив при давлениях до 10 атм и провести сравнительный анализ полученных данных с результатами химико-кинетического моделирования. 3. Так называемые "холодные" пламёна 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 пламён различных топлив, провести измерение химической структуры таких пламён и моделирование кинетики протекающих реакций.</p>

<p>Коробейничев Олег Павлович, д.ф.-м.н.</p> <p>Палецкий Александр Анатольевич, д.ф.-м.н.</p> <p>Терещенко Александр Георгиевич, к.ф.-м.н.</p>	<p>Кинетики процессов горения</p>	<p>Эксп. корпус 30 16 29</p>	<p>333 28 52 333 33 46</p>	<p>korobein@kinetics.nsc.ru</p> <p>paletsky@kinetics.nsc.ru</p> <p>tereshag@kinetics.nsc.ru</p>	<p>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 Hidden HPR-60.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p>	<p>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 Hidden HPR-60.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p>
<p>Кулик Леонид Викторович, д.ф.-м.н., профессор РАН</p>	<p>Химии и физики свободных радикалов</p>	<p>205</p>	<p>8-913-773-1376</p>	<p>chemphy@kinetics.nsc.ru</p>	<p>Кинетика светоиндуцированного разделения зарядов в активной среде органических фотовольтаических ячеек по данным импульсного ЭПР с лазерным возбуждением</p>	<p>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.</p>
<p>Медведев Николай Николаевич, д.ф.-м.н.</p>	<p>Молекулярной динамики и структуры</p>	<p>319</p>	<p>333 28 54</p>	<p>nikmed@kinetics.nsc.ru</p>	<p>Компьютерное моделирование и анализ структуры сложных молекулярных систем.</p>	<p>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.</p>
<p>Поздняков Иван Павлович, к.х.н.</p>	<p>Фотохимии</p>	<p>313</p>	<p>333 23 85 8 913 776 09 01</p>	<p>pozdneyak@kinetics.nsc.ru</p>	<p>Экологическая фотохимия в водных растворах.</p>	<p>Изучение механизмов и продуктов фотодегградации приоритетных загрязнителей в водных растворах для разработки новых фотохимических подходов к водоочистке. Комбинирование времяразрешенных 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.</p>

<p>Поляков Николай Эдуардович, Д.х.н.</p> <p>Селюткина Ольга Юрьевна, к.ф.-м.н.</p>	<p>Магнитных явлений</p>	<p>312</p>	<p>8 923 145 80 67</p>	<p>olga.gluschenko@gmail.com</p>	<p>Темы:</p> <ol style="list-style-type: none"> 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. 	<p>Описание:</p> <ol style="list-style-type: none"> 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.
<p>Уваров Михаил Николаевич, к.ф.-м.н.</p>	<p>Химии и физики свободных радикалов</p>	<p>223</p>	<p>333 13 77</p>	<p>uvarov@kinetics.nsc.ru</p>	<p>Светоиндуцированные радикалы и продукты фотодеградации в активном слое органических фотовольтаических ячеек: исследования методами спектроскопии оптического поглощения, фотоллюминесценции, ЭПР-спектроскопии.</p>	<p>Объекты исследования: органические полупроводящие материалы (как полимерные, так и непалимерные) и композиты, применяемые в качестве активных слоёв современных моделей органических солнечных батарей.</p> <p>Цель работы: описать механизмы возникновения стабильных радикалов - дефектов, образующихся в исследуемых материалах.</p> <p>Методы исследования: спектроскопия оптического поглощения, фотоллюминесцентная 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.</p>
<p>Черемисин Александр Алексеевич, д.ф.-м.н.</p>	<p>Дисперсных систем</p>	<p>318</p>	<p>333 07 87</p>	<p>cheremisin@kinetics.nsc.ru</p>	<ol style="list-style-type: none"> 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. 	<p>Общая тематика: перенос аэрозольных частиц и кластеров в разреженных газах и плазме при наличии внешних полей и излучений.</p> <ol style="list-style-type: none"> 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, пирокумулятивные 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).
<p>Юркин Максим Александрович, к.ф.-м.н.</p>	<p>Цитометрии и биокинематики</p>	<p>Корпус-модуль</p>	<p>8 913 928 05 82</p>	<p>yurkin@gmail.com</p>	<p>Разработка методов компьютерного моделирования взаимодействия</p>	<p>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. https://scattering.ru/students.pdf</p>