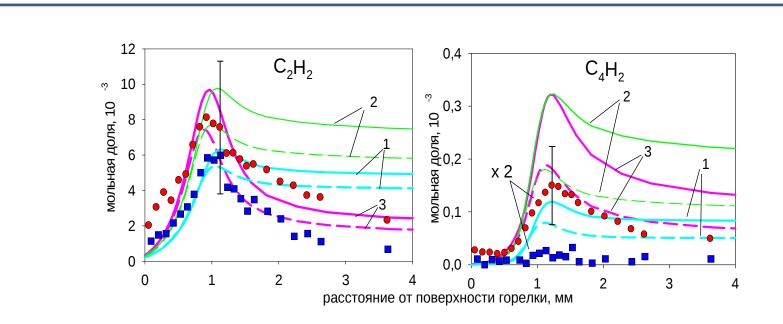
Горение углеводородов с добавкой спиртов: молекулярный механизм наблюдаемого уменьшения концентрации полиароматических углеводородов (ПАУ) и сажи в выхлопных газах двигателей

Программа V.36.1. Разработка и адаптация новых физических методов и их применение для исследования химического строения и свойств веществ и процессов на молекулярном, надмолекулярном и микроскопическом уровнях (координатор д.ф.-м.н. С.А. Дзюба)

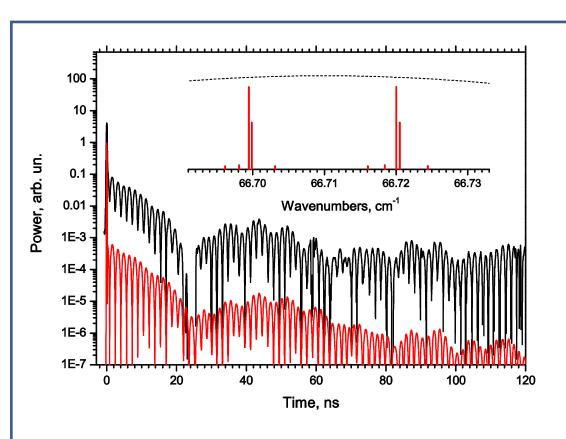


Экспериментальные (точки) и рассчитанные из трех разных теорий (линии) профили концентрации предшественников ПАУ и сажи ацетилена (слева) и диацетилена (справа). Красные точки и сплошные линии – пламя этилена; синие квадраты и пунктирные линии – пламя смеси этилен/этанол (1:1). Видно, что в присутствии этанола формирование в пламени ацетилена и диацетилена подавляется.

S.A. Yakimov et al, Combust. Explos. Shock Waves, 48 609-619 (2012)

Оптическая свободная индукция в терагерцовой области при возбуждении лазером на свободных электронах

Программа V.36.1. Разработка и адаптация новых физических методов и их применение для исследования химического строения и свойств веществ и процессов на молекулярном, надмолекулярном и микроскопическом уровнях (координатор д.ф.-м.н. С.А. Дзюба)

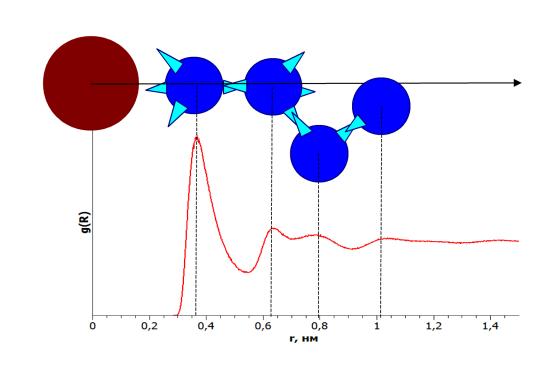


Новый эффект в терагерцовой спектроскопии: наблюдение сигнала оптической свободной индукции. Пример: сигнал в газообразном HBr при длине волны облучения 66.7 см-1. Черная линия эксперимент, красная - расчет (сдвинута по вертикали для наглядности). Главные осцилляции обусловлены изотопным расщеплением линии поглощения, более медленные связаны с квадрупольной структурой спектра. На вставке показана структура спектра HBr в этой области. Результат открывает возможность получения спектров высокого разрешения из timedomain измерений в терагерцовой области. (совместно с ИЯФ СО РАН)

E.N. Chesnokov , V.V. Kubarev, P.V. Koshlyakov, G.N. Kulipanov, Laser Phys/ Letters, submitted

Структура ближайшего окружения гидрофобных частиц в воде

Программа V.36.1. Разработка и адаптация новых физических методов и их применение для исследования химического строения и свойств веществ и процессов на молекулярном, надмолекулярном и микроскопическом уровнях (координатор д.ф.-м.н. С.А. Дзюба)

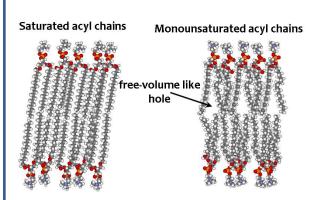


Гидрофобные взаимодейстствия определяют самоорганизацию и укладку биологических молекул – липидов, белков и других. Количественное же их описание встречает значительные трудности. Проведенный расчет методами молекулярной динамики гидратной оболочки вокруг гидрофобной сферической частицы. Ближайшие молекулы воды (первый пик функции радиального распределения вокруг частицы) имеют преимущественное направление водородной связи по радиус-вектору, идущему из центра частицы. Это приводит к тому, что молекулы следующего слоя (второй пик) располагаются «зеркально» к этим молекулам первого слоя. Молекулы воды в третьем слое располагаются, под тетраэдрическим углом к радиусу-вектору (третий пик), начиная формировать структуру как в чистой воде. Полученные результаты позволяют с количественной точки зрения описывать гидрофобныевзаимодействия.

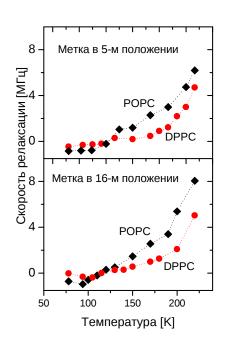
Medvedev N.N. et al, under preparation

Динамика насыщенных и ненасыщенных липидов в биологических мембранах при низких температурах

Программа V.36.1. Разработка и адаптация новых физических методов и их применение для исследования химического строения и свойств веществ и процессов на молекулярном, надмолекулярном и микроскопическом уровнях (координатор д.ф.-м.н. С.А. Дзюба)



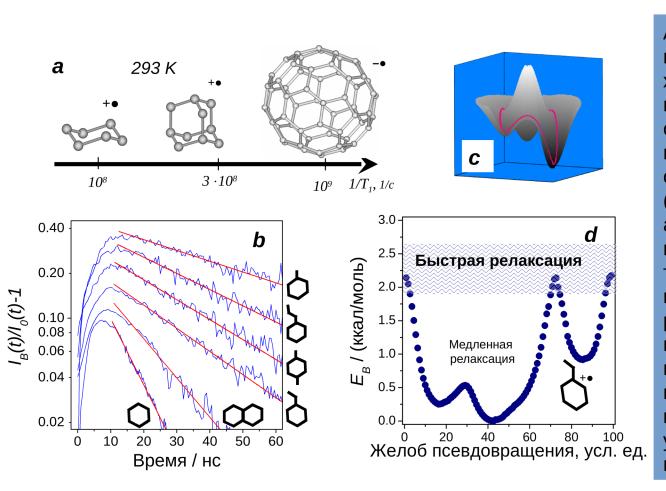
Насыщенные липиды (слева) и ненасыщенные липиды (справа) отличаются плотностью упаковки в биомембране. При комнатной температуре молекулярная подвижность в первом случае заметно выше, чем во втором. Проведенное исследование показало, что измеряемая методами импульсного ЭПР спиновых меток малоамплитудная молекулярная подвижность отличается также вплоть до очень низких температур (до 120 К). Полученные результаты важны для понимания молекулярных механизмов криоконсервации биологических объектов.



Температурная зависимость скорости спиновой релаксации в мембранах РОРС (ненасыщенные липиды) и DPPC (насыщенные липиды) с включенными молекулами-зондами стеариновой кислоты с меткой в 5-м или 16-м положениях углерода алкильной цепи.

N.V. Surovtsev et al, J. Phys. Chem. B, 116, 8139-8144 (2012).

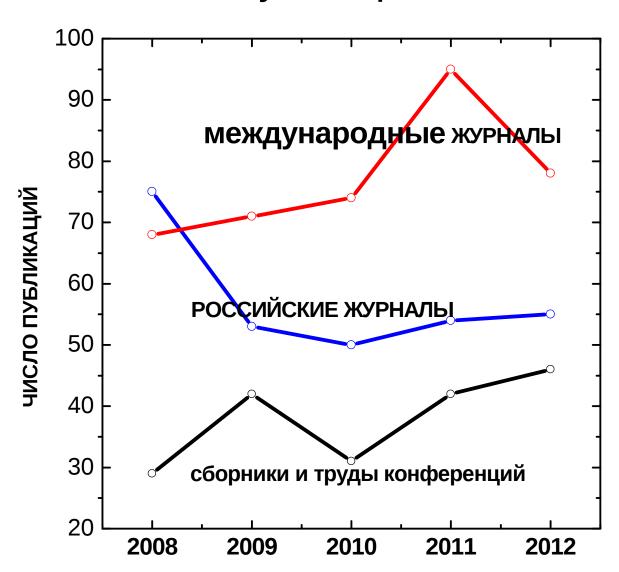
Новый механизм парамагнитной релаксации радикалов с квазивырожденными вибронными состояниями



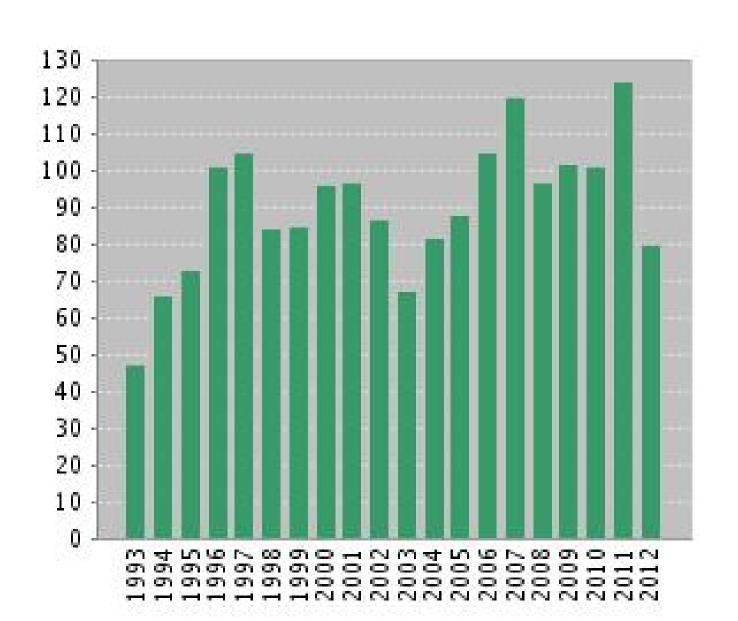
Аномально высокая скорость парамагнитной релаксации, характерная для высокосимметричных систем с открытой оболочкой (а), может иметь место и в менее симметричных радикалах (b). Квантовохимический анализ поверхностей потенциальной энергии таких радикалов (c, d)показал, что наблюдаемая релаксация связана с наличием точки конического пересечения и обусловлена возбуждением в электронноколебательные состояния на уровень вершины барьера псевдовращения (d).

V. I. Borovkov, I. V. Beregovaya, L. N. Shchegoleva, P. A. Potashov, V. A. Bagryansky, Y. N. Molin. Radical ions with nearly degenerate ground state: Correlation between the rate of spin-lattice relaxation and the structure of adiabatic potential energy surface. *II J. Chem. Phys.*, 2012, V.137, №10, 104305.

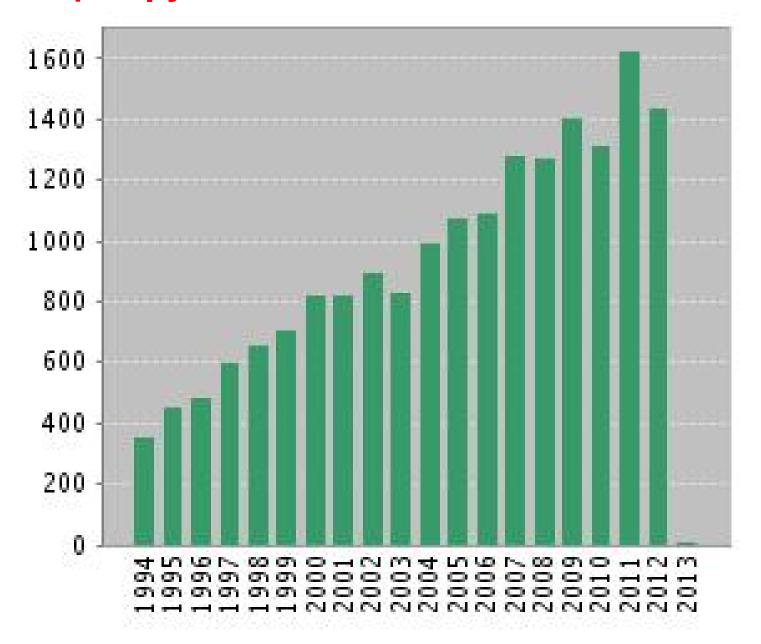
Публикации



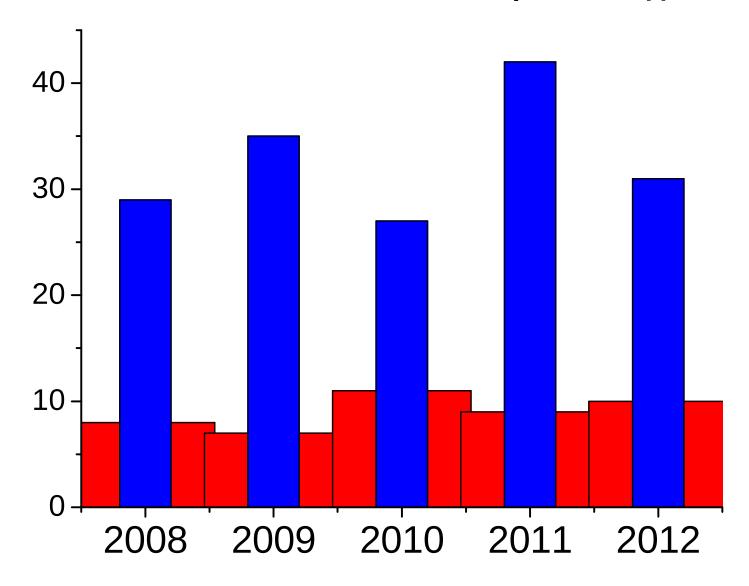
Количество статей в Web of Science



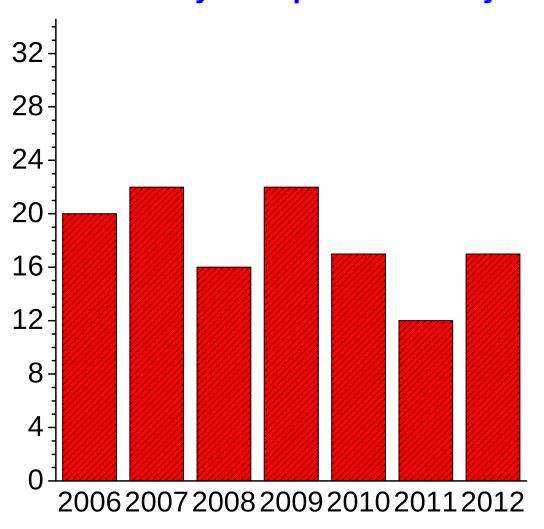
Цитируемость по Web of Science



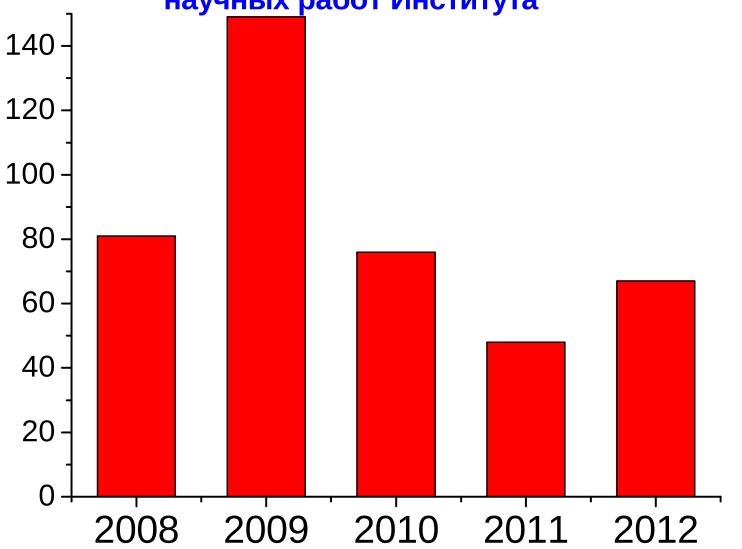
Количество семинаров по годам



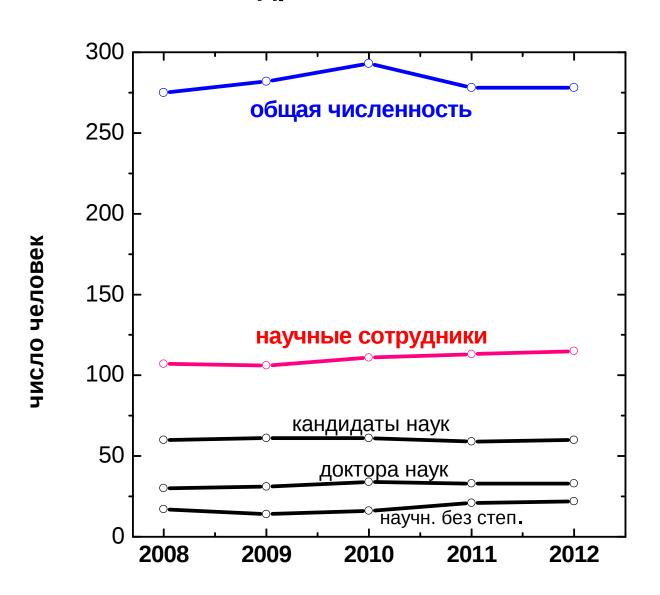
Количество работ, поданных на конкурс научных работ Института



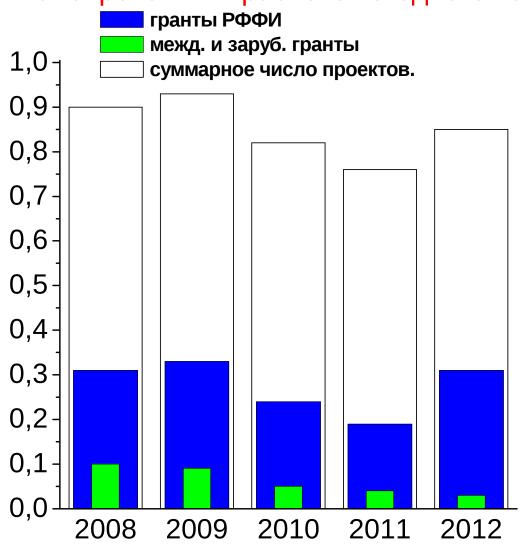
Количество статей, участвовавших в конкурсах научных работ Института



Кадровый состав



Количество грантов, договоров и проектов внебазового финансирования в расчете на одного научного сотрудника



Число заседаний Ученого совета

