



Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук

Конференция
Физика водных растворов

12 декабря 2018 г.

**Конференция состоится 12 декабря 2018 года в 10:00
в Институте общей физики им. А.М. Прохорова РАН**

по адресу

Москва, ул. Вавилова, д. 38, корпус 1, 3-й этаж, конференц-зал

Организатор конференции

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Председатель конференции

академик РАН И.А. Щербаков

Председатель программного комитета конференции

профессор Г.А. Ляхов, ИОФ РАН

Оргкомитет

В.И. Пустовой, ИОФ РАН

Н.П. Хакамова, ИОФ РАН

Т.Б. Воляк, ИОФ РАН

Программа

10:00–10:15

И.А. Щербаков

«Нанообъекты как составляющая часть водных растворов»

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Обсуждается влияние оптического, плазменного и механического воздействия на макроскопические свойства водных растворов.

Констатируется важная роль нанообъектов, присутствующих в жидкости или генерируемых в процессе взаимодействия с внешними источниками возмущения, в формировании макроскопических свойств растворов.

Высказывается гипотеза о том, что присутствие нанообъектов в водных растворах определяет протекание самых разнообразных процессов — от образования ударных волн до изменения ионного состава и регуляции биологической активности.

10:15–10:45

Г.А. Ляхов, И.А. Щербаков

«Подходы к физическим механизмам и теории низкоконтрационных эффектов в водных растворах»

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Проанализированы механизмы немонотонных зависимостей люминесценции от концентрации C ионных примесных центров в кристаллах. Показано, что один из них связан с объединением активных центров из соседних ячеек решетки. Идентификацию активных агрегатов и распределение их по размерам здесь определяет квантовый расчет в согласовании со спектральными и релаксационными данными эксперимента.

Для жидких сред (структурно нерегулярных) исходными служат модельные уравнения состояния воды и водных растворов. Ключевым является учет водородных связей (ВС) между молекулами воды и растворимого вещества (S). Построены аналитические модели частных механизмов вклада ВС в уравнения PVT - и CT -состояний. Объединение этих моделей, особенно с участием капельных фаз, обязательно. Модельно выделен энтропийный механизм минимума C_P воды. В модели «мерцающих» ВС выведены условия расслоения с образованием S -капель при низких C .

Для описания кинетики реакций S -агрегатов (и других продуктов воздействия на раствор) с целевым объектом уместно введение в модель ланжевеновских или параметрических шумов. Показано, что фоккер-планковское решение для кинетической модели реакции энзимного типа с белым шумом концентрации дает ван-дер-ваальсово «уравнение состояния», где T^{-1} пропорционально квадратичным флуктуациям E , то есть со своим фазовым переходом.

Для отдельной важной задачи анализа «сильных разбавлений» и резких перемешиваний раствора подходящим представляется использование математического аппарата теории перемежаемости. Здесь перспективны и поиски лавинных реакционных механизмов.

10:45–11:15 Н.Ф. Бункин^{1,2}, А.В. Шкирин¹, С.В. Гудков¹, Н.В. Пеньков³, С.Н. Чириков⁴, В.А. Козлов²
«Физическая природа мезоскопических неоднородностей в высокоразбавленных водных суспензиях белковых частиц»

¹ *Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН*

² *Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана*

³ *Институт биофизики клетки РАН*

⁴ *Научно-исследовательский ядерный университет МИФИ*

В водных суспензиях белковых частиц (антитела к интерферону-гамма; суспензия I) и водном растворе этилового спирта (суспензия II) методами лазерной фазовой микроскопии и динамического рассеяния света обнаружены дисперсные частицы с размерами, соответственно, ~300 нм и ~900 нм, которые распознаются как агрегаты антител. Эксперименты показали, что в образце, полученном разведением С12 суспензии I в воде, также присутствуют мезочастицы, которые можно связать с дисперсными контаминантами либо с остаточными белковыми агрегатами, которые смогли сохраниться благодаря флотации. На флотационный механизм сохранения мезонеоднородностей в высокоразбавленных суспензиях указывают обнаруженные комплексы белково-подобных частиц и газовых нанопузырьков. Методом постадийной фильтрации показано, что в разведении С12 суспензии II доминирующей мезокомпонентой являются нанок капли чистого этанола с концентрацией ~10⁹ см⁻³. Отсутствие белково-подобных частиц в высокоразбавленных суспензиях II можно объяснить отсутствием в них нанопузырьковой фазы, а следовательно, и флотации.

11:15–11:45 Перерыв на кофе

11:45–12:15 Н.В. Пеньков, В.А. Яшин, Н.Э. Швирст, Е.Е. Фесенко
«Терагерцовая спектроскопия как метод исследования структуры водных растворов»

Институт биофизики клетки РАН

Проведено исследование воды и ряда водных растворов с использованием ТГц-спектроскопии временного разрешения в диапазоне от 1,2 до 200 см⁻¹. Полученные спектральные ТГц-данные, дополненные известными данными по ГГц-спектроскопии, содержат информацию о коллективной динамике молекул воды в растворах. На основе спектральных данных рассчитана комплексная диэлектрическая проницаемость изучаемых растворов. Фитинг дает ее разложение на составляющие: НЧ (дебаевская) релаксационная полоса (0,6 см⁻¹), ВЧ релаксационная полоса (около 20 см⁻¹), поперечная (50 см⁻¹) и продольная (180 см⁻¹) трансляционные колебательные полосы. Показано, что амплитуда 20 см⁻¹-полосы в спектрах разных растворов возрастает с ослаблением структурированности. Был сделан вывод, что эта полоса обусловлена поворотной релаксацией свободных молекул воды. Предложен метод расчёта их доли (2–3%). Применением метода к растворам глобулярного белка установлено, что гидратные оболочки белка могут состоять из двух слоёв: ближнего, с сильно связанными молекулами воды, и дальнего, с менее упорядоченной, чем у чистой воды, структурой.

12:15–12:45 Е.Е. Фесенко¹, А.Я. Глывштейн², Н.К. Чемерис¹, В.Н. Казаченко¹, В.И. Гелетюк¹
«Действие миллиметровых волн на ионные каналы клеточных мембран. Роль воды»

¹ *Институт биофизики клетки РАН*

² *Всероссийский научно-исследовательский институт «Градиент»*

Установлено, что миллиметровые волны значительно изменяют характеристики ионных Са-зависимых калиевых каналов (в частности, вероятности пребывания канала в открытом состоянии) плазматической мембраны почечной клетки. С использованием метода Patch-clamp, позволяющего работать с выделенным из клетки фрагментом мембраны, показано, что практически такое же изменение характеристик каналов можно получить заменой в экспериментальной камере

необлученного раствора на раствор, модифицированный облучением в миллиметровом диапазоне. Эта способность облученного раствора изменять поведение каналов сохраняется десятки минут и может объясняться его структурными изменениями, которые придают раствору новые свойства. Обсуждаются результаты экспериментов по регистрации изменений свойств воды и водных растворов, связанных с предварительным физическим воздействием на них. Это явление может найти практическое применение в медицине и технике.

12:45–13:15 Н.Ф. Бункин^{1,2}, Г.А. Ляхов¹, **А.В. Шкирин**¹, А.В. Кобелев³, Н.В. Пеньков³, Е.Е. Фесенко (мл.)³

«Мезокапельная гетерогенность водных растворов полярных органических соединений при низких концентрациях»

¹ Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

² Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

³ Институт биофизики клетки РАН

Методами динамического рассеяния света и лазерной фазовой микроскопии в водных растворах ряда полярных органических соединений обнаружена и характеризуется капельная фаза, обогащенная органикой. В растворах тетрагидрофурана и трет-бутанола с умеренной растворимостью (её индекс пропорционален дипольному моменту молекул и числу водородных связей (ВС) с молекулами H₂O) наблюдается сильный пик светорассеяния при молярных концентрациях от 0,02 до 0,08. Измеренные размеры капель здесь ≈100 нм. В растворах глицерина и этиленгликоля с высокой растворимостью в воде эти эффекты выражены слабее, а в растворах с низкой растворимостью сильнее. Выдвинута гипотеза, объясняющая особенности мезорасслоения рассмотренных водных растворов способностью растворяемых молекул образовывать ВС с молекулами H₂O. Построена теоретическая модель расслоения бинарных растворов с «мерцающими» (локально живущими конечное время) межмолекулярными ВС, которая предсказывает существование низкоконтрационного пика светорассеяния.

13:15–14:00 **Перерыв на обед**

14:00–14:30 К.В. Коваленко¹, С.В. Кривохижа¹, А.Д. Кудрявцева¹, М.В. Тареева¹, **Л.Л. Чайков**^{1,2}, Н.В. Чернега¹, М.А. Шевченко¹

«Структура частиц водной эмульсии: исследование оптическими методами»

¹ Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

² Научно-исследовательский ядерный университет МИФИ

Оптическими методами, по интенсивности светорассеяния и по сдвигу линии низкочастотного вынужденного комбинационного рассеяния, показано, что частицы эмульсии СОЖ Эмульсол ЭМ-1 в воде не являются сплошными каплями, а имеют сложную внутреннюю структуру. То же относится и к эмульсиям воды в маслах.

14:30–15:00 **В.И. Лобышев**
«Диэлектрические характеристики разбавленных растворов диклофенака»
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Измерения диэлектрических характеристик растворов были проведены в диапазоне частот 20 Гц–10 МГц с помощью прецизионного анализатора импеданса WK 65120 BD1 в кювете объемом 0,6 мл с коаксиальными цилиндрическими электродами из титана. Исследован ряд последовательных сотенных разведений натриевой соли диклофенака (ДФ) (D6899 Sigma), сопровождающихся механическим перемешиванием. Образец С1 с концентрацией ДФ $3,7 \cdot 10^{-3}$ М пропускали через фильтр с порами 0,2 мкм (Sartorius, Minisart) и использовали для получения разведений С2, С3 и т.д. Была использована вода стандарта / с удельным сопротивлением 18,2 МОм·см. С

интервалом в неделю для всего ряда разведений зарегистрированы частотные спектры комплексной диэлектрической проницаемости (ДП). В НЧ-области во всех разведениях наблюдалось сильное увеличение ДП вследствие поляризации электродов, возрастающей с увеличением проводимости. Релаксационных ВЧ-процессов ни в одном разведении ДФ не наблюдалось. Обнаружена высокая степень корреляции «спектров концентраций» для ДП и электропроводности в двух независимо приготовленных рядах растворов ДФ в интервале С3–С12. В образце С8 зафиксировано резкое увеличение проводимости и НЧ-увеличение ДП при незначительном изменении ВЧ ДП.

15:00–15:30

А.К. Лященко

«Диэлектрические и радиояркие спектры водных растворов и возможные биологические эффекты миллиметровой области»

Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН

Представлена структурно-кинетическая модель ориентационной поляризации воды, включающая коллективные процессы релаксации и реакции перераспределения молекул воды в сетке водородных связей. Модель распространяется на электролитные растворы с концентрациями, при которых гидратация и структура объемной воды определяют поляризацию. Выделены особенности гидрофильной и гидрофобной гидратации. На основе модели описаны диэлектрические спектры растворов для большого объема экспериментальных данных. Выделены особенности электролитных растворов, в которых вклад ионных потерь сохраняется в миллиметровом диапазоне. Рассчитаны и сопоставлены с экспериментальными данными радиояркие контрасты, устанавливающие относительные изменения спектров растворов в сравнении с водой. Для растворов с биокомпонентами обсуждены возможные связи полученных результатов с кинетикой энергообмена между клеткой и внеклеточной жидкостью.

15:30–16:00

Перерыв на кофе

16:00–16:30

Е.В. Бармина, С.В. Гудков, А.В. Симакин, Г.А. Шафеев

«Диссоциация жидкостей под действием плазмы лазерного пробоя»

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Представлены результаты исследования взаимодействия наносекундного лазерного излучения с водными растворами коллоидных систем. Детально проанализированы процессы диссоциации молекул воды под действием электронного удара плазмы. Установлено, что при лазерном облучении водных растворов происходит разложение воды на молекулярные водород, кислород и перекись водорода. Под действием плазмы вокруг наночастиц образуются также гидроксильные радикалы. Обсуждается корреляция свойств плазмы лазерного пробоя с генерацией продуктов диссоциации молекул воды, а также влияние концентрации наночастиц на выше упомянутые процессы.

16:30–17:00

А.Ф. Бункин, С.М. Першин

«Изучение физики гидратирования биомолекул и наночастиц в водных растворах и суспензиях методами когерентной лазерной спектроскопии»

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Зарегистрированы узкие вращательные резонансы в спектрах четырехфотонного рассеяния в водных растворах биополимеров и суспензиях углеродных нанотрубок в диапазоне 0–200 см⁻¹. Измерения относительных интенсивностей резонансов позволили определить вариации относительных концентраций спин-изомеров H₂O в растворе. Обнаружено, что вклад молекул орто-H₂O в регистрируемый сигнал в растворах биополимеров растет, а вклад молекул пара-H₂O падает. Это указывает на корреляцию процесса гидратации молекул белка и ДНК в естественных условиях с концентрациями спиновых изомеров H₂O. При денатурации ДНК эта корреляция утрачивается, но растет вклад

вращательных резонансов молекул H_2O_2 в сигнал когерентной спектроскопии. Это указывает на рост концентрации молекул H_2O_2 в гидратных слоях.

С.М. Першин

«Бимодальная концентрационная зависимость рассеяния Рэлея и смещения гравитационного центра ОН полосы КР в водном растворе фенозана калия. Модель гидратации»

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Обнаружен рост флуктуаций рэлеевского и комбинационного (КР) рассеяний в водных растворах анти-оксиданта фенозана калия (ФК) с концентрациями 10^{-5} – 10^{-9} и 10^{-13} – 10^{-18} М. Для наблюдения рассеяний использовано импульсное излучение второй гармоники (527 нм) $\text{Nd}^{3+}:\text{YVO}_4$ -лазера. Выявлена корреляция роста упругого рассеяния Рэлея и его флуктуаций со смещением центра ОН полосы КР в воде от характеристической для льда частоты (3200 см^{-1}). Анализ развития неустойчивостей фазового равновесия проведен по данным наблюдения квазигармонических колебаний «нагрев-переохлаждение» центра ОН полосы в воде с амплитудой до 50 см^{-1} . Обсуждается модель флуктуаций числа водородных связей в предположении о формировании/распаде упорядоченного слоя гидратации молекул ФК в воде.

Для заметок

Для заметок

Для заметок

Для заметок