

ПРОТОКОЛ

заочного заседания научной комиссии в области химических наук

21 ноября 2022 г.

№ 11/7/4-02-25

Председательствующий – А.А. Маньшина, профессор

Секретарь – Е.А. Цыганкова, ведущий специалист

Присутствовали: 19 из 24 членов комиссии (список прилагается).

Повестка дня:

1. О рассмотрении заявки старшего преподавателя Тупикиной Елены Юрьевны на участие на конкурс 2022 года Оптического общества имени Д.С. Рождественского по присуждению молодым ученым медали имени профессора В.С. Летохова за новаторские работы по лазерной физике, спектроскопии и их приложениям;

2. О рассмотрении заявки доцента Шакировой Юлии Равилевны на участие на конкурс 2022 года Оптического общества имени Д.С. Рождественского по присуждению молодым ученым медали имени профессора В.С. Летохова за новаторские работы по лазерной физике, спектроскопии и их приложениям;

3. О дополнении Перечня потенциальных научных руководителей аспирантов направления «Химия».

1. О рассмотрении заявки старшего преподавателя Тупикиной Елены Юрьевны на участие в конкурсе 2022 года Оптического общества имени Д.С. Рождественского по присуждению молодым ученым медали имени профессора В.С. Летохова за новаторские работы по лазерной физике, спектроскопии и их приложениям.

Научная комиссия рассмотрела материалы заявки старшего преподавателя Тупикиной Елены Юрьевны на участие в конкурсном отборе на присуждение медали им. В.С. Летохова.

Характеристика работы или работ кандидата, положенных в основу выдвижения, их значение для развития оптических наук или технологий: Е.Ю. Тупикиной были разработаны и развиты методики спектральной диагностики комплексов с водородной связью, а именно, установлены количественные зависимости между спектральными параметрами (ИК и ЯМР) и геометрией, энергией, а также свойствами внешней электронной оболочки для разнообразных комплексов с водородной связью. В частности, при помощи квантово-химических методов построены простые в использовании корреляционные уравнения, связывающие спектральные параметры с геометрией и энергией для водородных связей $\text{FH}\cdots\text{X}$, $\text{NH}\cdots\text{X}$ и $\text{CH}\cdots\text{X}$ ($\text{X} = \text{O}, \text{N}, \text{F}$), $\text{OH}\cdots\text{O}$. На примере ионных кластеров вида $[\text{FH}]_n\text{Cl}(-)$ отработана методика исследования систем с множественными водородными связями, в частности их взаимного влияния (кооперативное или антикооперативное) по величинам колебательных частот и химических сдвигов. Была разработана новая методика зондирования топологических особенностей внешних электронных

оболочек атомов, молекул и молекулярных комплексов атомом гелия-3 с использованием измеримого спектрального параметра – химического сдвига δ_{sc} .

Предложенные Е.Ю. Тупикиной методы оценки прочности и геометрии водородных связей имеют особую практическую значимость для исследования водородных связей в неупорядоченных системах, где неприменимы кристаллографические методы, а также для внутримолекулярных водородных связей, когда прямая оценка энергии водородной связи затруднена. Предложенные закономерности могут найти своё применение не только в фундаментальных исследованиях, но и в материаловедческих задачах, в частности в области современного дизайна супрамолекулярных систем и органических функциональных материалов, ассоциированных посредством множественных нековалентных связей, обладающих свойством самовосстановления.

Номинация: фундаментальные исследования.

Краткая формулировка, за что выдвигается кандидат: за развитие методов спектральной диагностики комплексов с водородной связью.

ПОСТАНОВИЛИ: по итогам голосования (за – 19, против – нет, воздержались – нет), рекомендовать старшего преподавателя Тупикину Елену Юрьевну к участию в конкурсе 2022 года Оптического общества имени Д.С. Рождественского по присуждению молодым ученым медали имени профессора В.С. Летохова за новаторские работы по лазерной физике, спектроскопии и их приложениям.

2. О рассмотрении заявки доцента Шакировой Юлии Равилевны на участие в конкурсе 2022 года Оптического общества имени Д.С. Рождественского по присуждению молодым ученым медали имени профессора В.С. Летохова за новаторские работы по лазерной физике, спектроскопии и их приложениям.

Научная комиссия рассмотрела материалы заявки доцента Шакировой Юлии Равилевны на участие в конкурсном отборе на присуждение медали им. В.С. Летохова.

Исследования, выполненные Ю.Р. Шакировой на протяжении десяти лет, посвящены разработке методов направленного синтеза гомо- и гетерометаллических люминесцентных комплексов переходных металлов, исследованию их оптических свойств и выявлению закономерностей между составом/строением полученных соединений и их фотофизическими характеристиками с целью дальнейшего их использования в области биофотоники.

В ходе этих исследований было получено несколько классов соединений на базе различных металлоцентров (Au(I), Cu(I), Ag(I), Re(I), Pt(II), Ir(III), Eu(III)) и органических лигандов, для некоторых из них были разработаны принципиально новые методики синтеза. Для полученных соединений были выявлены закономерности между строением и электронными свойствами лигандного окружения, природой металлоцентра, наличием металлофильных взаимодействий и ключевыми фотофизическими параметрами, такими как длины волн поглощения, возбуждения и эмиссии, а также квантовые выходы эмиссии и времена жизни возбужденных состояний. Установленные закономерности послужили ос-

новой для оптимизации свойств получаемых эмиттеров, в том числе для дизайна комплексов, демонстрирующих двухквантовое поглощение и эмиссию в ближнем инфракрасном диапазоне спектра, что является принципиальным важным достижением в дизайне фосфоресцентных хромофоров, пригодных для применения в *in vivo* биомедицинских экспериментах. Для ряда соединений были обнаружены и исследованы сенсорные свойства – чувствительность параметров эмиссии по отношению к температуре, pH, концентрации кислорода, присутствию паров растворителей, что открывает возможности их использования для количественных измерений указанных параметров в биологических системах. Проведенные исследования являются необходимым шагом на пути практического применения фосфоресцентных комплексов в биофотонике, как в качестве люминесцентных зондов для исследования структуры биологических объектов, так и в качестве сенсоров для люминесцентной микро- и макроскопии, в том числе с детектированием сигнала в режиме измерения времени жизни фосфоресценции (Phosphorescence Lifetime Imaging Microscopy - PLIM).

Потенциал применения полученных комплексов в качестве зондов для систем доставки лекарств (липосомы и полимерные наночастицы) отражены в следующих публикациях: *Scientific Reports*, 2017, 7, 41991; *RSC Adv.*, 2020, 10, 14431-14440. Установлено, что внедренные фосфоресцентные зонды позволяют отслеживать локализацию и скорость выведения наночастиц при интравитреальной инъекции, что является важной информацией при разработке систем доставки лекарственных препаратов.

Также Ю.Р. Шакировой разработан подход, позволяющий получить биосовместимые полимерные наночастицы, допированные комплексом европия(III), проявляющие температурную чувствительность интенсивности и времени жизни возбужденного состояния люминесценции в биологически-значимом интервале температур (*ACS Appl. Polym. Mater.*, 2020, 2(2), 537-547). Дальнейшие исследования в данном направлении позволили продемонстрировать возможность использования такого рода частиц для оценки локальной температуры на клеточном уровне, а также для выявления реакции клеток на химический шок, выражающейся в повышении внутриклеточной температуры (неопубликованные результаты, статья на рецензировании в журнале *Molecules*).

Водорастворимые комплексы рения (I), проявляющие чувствительность интенсивности и времени жизни фосфоресценции к кислороду, были опробованы в качестве сенсоров для определения концентрации кислорода в биологических моделях *in vitro* и *in vivo* (*Adv. Sci.*, 2021, 8(20), 2102788). Было установлено, что эти соединения эффективно проникают через стенки кровеносных сосудов, а затем специфично связываются с коллагеном за счет наличия в составе комплексов сульфо-групп. В результате происходит фиксирование метки во внесосудистой коллагеновой матрице. Проведенные *in vivo* исследования на мышах показали, что с помощью полученного соединения можно не только отличать ткани опухоли, для которых характерна гипоксия, от здоровых тканей (на примере меланомы продемонстрирована разница в концентрациях кислорода), но и различать уровень оксигенации тканей в области, близкой к кровеносным сосудам, и бессосудистой области, что, в дальнейшем, может быть использовано для отслеживания нарушения кровоснабжения тканей.

Указанные выше исследования и разработки, выполненные Ю.Р. Шакировой, в области изучения и применения фосфоресцентных комплексов переходных металлов для целей биофотоники несомненно вносят существенный вклад в развитие этого научного

направления и выдвигаются на присуждение ей медали имени профессора В.С. Летохова по номинации «прикладные исследования».

ПОСТАНОВИЛИ: по итогам голосования (за – 17, против – 1, воздержались – 1), рекомендовать доцента Шакирову Юлию Равилевну к участию в конкурсе 2022 года Оптического общества имени Д.С. Рождественского по присуждению молодым ученым медали имени профессора В.С. Летохова за новаторские работы по лазерной физике, спектроскопии и их приложениям.

3. О дополнении Перечня потенциальных научных руководителей аспирантов

Научная комиссия рассмотрела обращение сотрудников Института химии по вопросу включения в Перечень потенциальных научных руководителей аспирантов.

На основании имеющихся предложений, предлагается дополнить Перечень потенциальных научных руководителей аспирантов направления «Химия», согласно нижеследующему.

Научная специальность 1.4.2. Аналитическая химия

1.15.	Тенникова Татьяна Борисовна	Профессор	Лаборатория биогибридных технологий
-------	-----------------------------	-----------	-------------------------------------

Научная специальность 1.4.3. Органическая химия

1.21.	Зенкевич Игорь Георгиевич	Профессор	Кафедра органической химии
1.22.	Карцова Людмила Алексеевна	Профессор	Кафедра органической химии

Научная специальность 1.4.4. Физическая химия

1.25.	Толстой Петр Михайлович	Профессор	Кафедра физической органической химии
-------	-------------------------	-----------	---------------------------------------

ПОСТАНОВИЛИ: по итогам голосования (за – 19, против – нет, воздержались – нет), рекомендовать проректору по учебно-методической работе дополнить Перечень потенциальных руководителей аспирантов направления «Химия», согласно вышеуказанным сведениям.

Председатель научной комиссии

Секретарь научной комиссии

А.А. Маньшина

Е.А. Цыганкова

Список присутствующих на заседании научной комиссии в области химических наук

Профессор, Кафедра лазерной химии и лазерного материаловедения	А.А. Маньшина
Генеральный директор, Закрытое акционерное общество «ИЦ «Технохим»	И.А. Арсеньев
Профессор, Кафедра общей и неорганической химии	Е.В. Грачева
Старший научный сотрудник, Кафедра аналитической химии	А.Р. Губаль
Доцент, Кафедра химии высокомолекулярных соединений	И.М. Зорин
Профессор, Кафедра химии высокомолекулярных соединений	Р.М. Исламова
Доцент, старший научный сотрудник, Акционерное общество «Радиевый институт им. В.Г. Хлопина»	М.Д. Караван
Профессор, Кафедра аналитической химии	Д.О. Кирсанов
Доцент, Кафедра физической химии	О.Ю. Курапова
Инженер-технолог, Закрытое акционерное общество «ИЦ «Технохим»	В.В. Литвинов
Генеральный директор, Общество с ограниченной ответственностью «АРТХИМ»	В.Н. Лукаш
Профессор, Кафедра физической химии	К.Н. Михельсон
Научный сотрудник, Лаборатория натуральных эколого-химических исследований Санкт-Петербургского Федерального исследовательского центра Российской академии наук	А.Г. Пилип
Доцент, Кафедра химической термодинамики и кинетики	И.А. Родионов
Доцент, Лаборатория синтеза биоактивных малых молекул Кафедры медицинской химии	А.В. Сапегин
Доцент, Кафедра лазерной химии и лазерного материаловедения	А.С. Тверьянович
Профессор, Кафедра физической органической химии	П.М. Толстой
Генеральный директор, Общество с ограниченной ответственностью «НПО «ТЕХПРОГРУПП»	А.В. Чирков
Руководитель проектов, Закрытое акционерное общество «ИЦ «Технохим»	А.Е. Шварев