



Лаборатория спиновой физики и спиновой химии

ТЕМЫ, ГРАНТЫ

- «Поиск и исследование новых систем, перспективных для квантовых компьютеров, спинтроники, оптоэлектроники и молекулярного магнетизма». К.М. Салихов, **бюдж.**
- «Магнитные и спиновые эффекты в многоспиновых системах при фотовозбуждении». **Грант Президента РФ, Р. Зарипов.**
- Ведущая научная школа «Экспериментальное и теоретическое исследование новых систем, перспективных, для квантовой информатики и квантовых вычислений, спинтроники, оптоэлектроники методами ЭПР, сканирующей зондовой микроскопии и фемтосекундной спектроскопии». **Рус. Салихов К.М.**
- Программа Президиума 1.28.** «Электронный спиновый резонанс, спин-зависимые электронные эффекты и спиновые технологии». **Рус. Салихов К.М.**
- Программа ОНИТ РАН.** «Синтез и исследование магнитных наноразмерных систем нанозлектроники, квантовой информатики и оптоэлектроники. **Рус. Салихов К.М.**

РФФИ

- Воронкова В.К.** - «Исследование влияния спин-спиновых взаимодействий на температуру блокирования намагниченности гетероспиновых кластеров с ионами Dy(III) или Tb(III)»
- Салихов К.М.** - «Исследование молекулярного механизма стабилизирующего и крипротекторного влияния трегалозы на функциональные свойства белков и белковых комплексов фотосинтетических реакционных центров (№ 15-43-02538_Поволжье)»

КОЛЛЕКТИВ ЛАБОРАТОРИИ

- зав. лаб. д.ф.-м.н. В.К. Воронкова
- г.н.с. - акад. К.М. Салихов
- в.н.с.: д.ф.-м.н. В.Е. Катаев (0.1), д.б.н. Х.Л. Гайнутдинов (0.4), к.ф.-м.н. Н.К. Соловаров (0.2 ст)
- с.н.с., к.ф.-м.н.: Ю.Кандрашкин, Л.И. Савостина (0.4), Р.Б. Галеев, Р.Б. Зарипов, А.А., Суханов, В. Андрианов (0.1), О.И. Гензидлов (0.5)
- н.с., к.ф.-м.н.: А. Б. Конов, М.Ю. Волков, И. Ишьяк
- н.с.: В. Ишьяк (0.5), А. Е. Мамбетов
- м.н.с.: К. Конов, М. Бакиров, И. Хайрулдин
- инж.: Абдрахманова С.Б., Андреева А.И.

НАГРАДЫ



Кев Минуллинович Салихов избран почетным членом Международного общества магнитного резонанса ISMAR в знак признания выдающегося вклада в магнитный резонанс (2015).

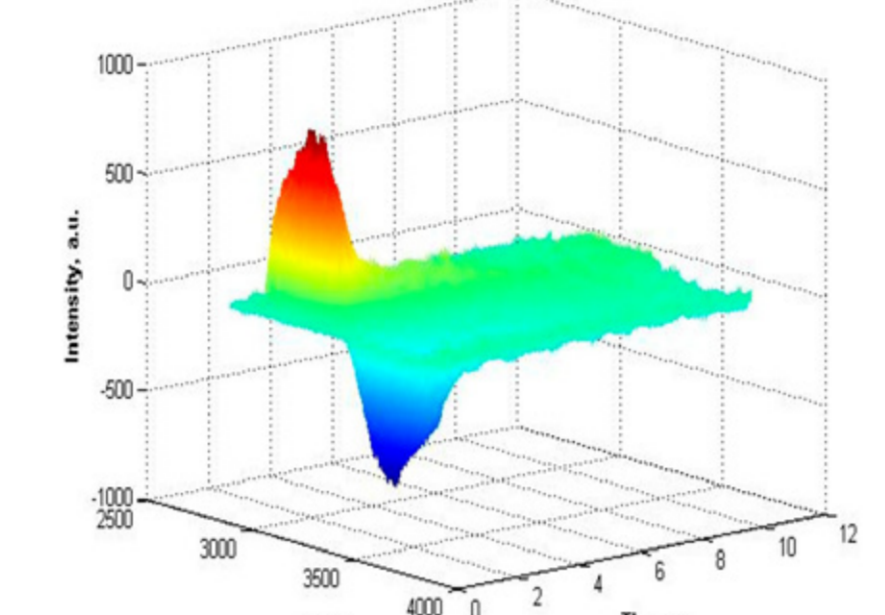


ФОТОВОЗБУЖДЕННЫЕ СИСТЕМЫ ВРЕМЯРАЗРЕШЕННЫЙ ЭПР

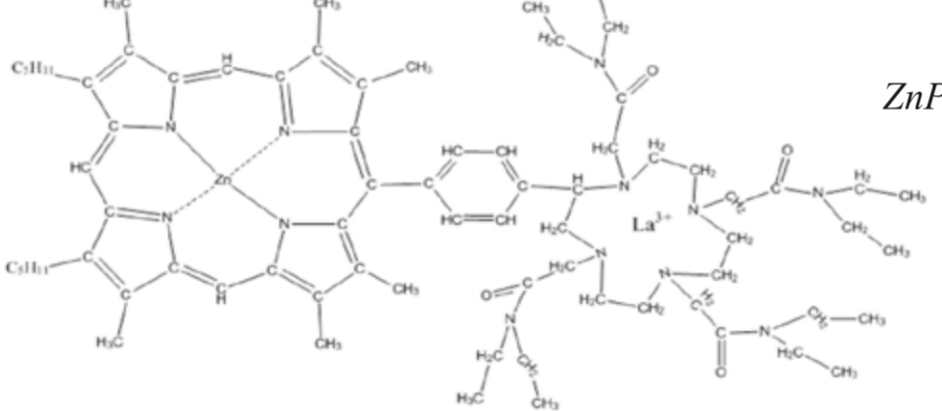
Одним из наиболее эффективных методов исследования короткоживущих фотовозбужденных состояний является времяразрешенный электронный парамагнитный резонанс. В 2015 году реализована возможность проведения исследований методом времяразрешенного ЭПР в W-диапазоне.



Исследование взаимодействия парамагнитных ионов с фотовозбужденными молекулами

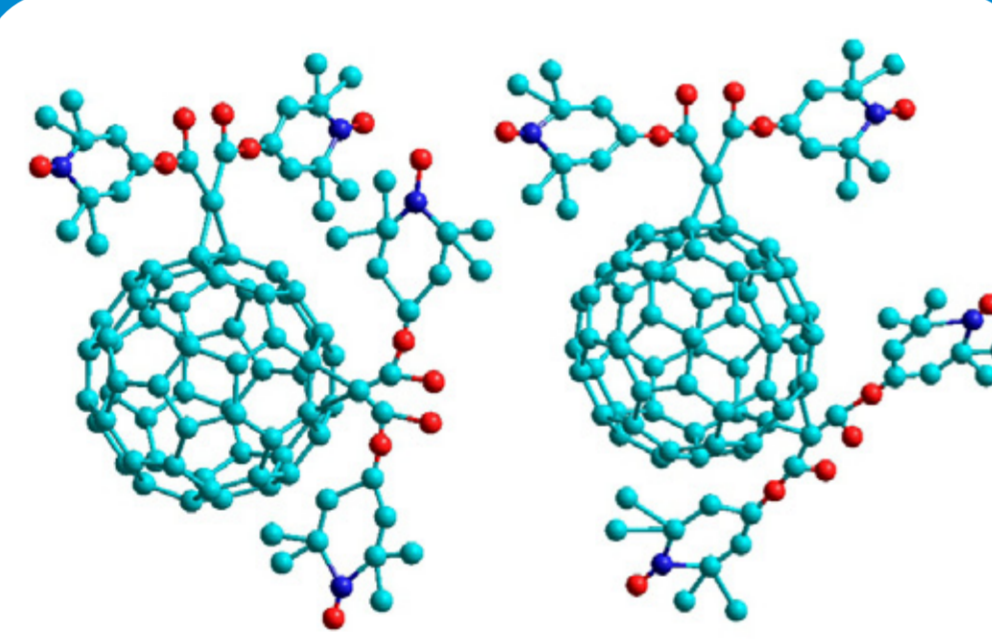


Трехмерное изображение времяразрешенного спектра ЭПР при температуре 20К для комплекса ZnPLa



Системы, в которых реализуется обменное взаимодействие с фотовозбужденными органическими молекулами, вызывают большой интерес, так как они открывают новые возможности для создания молекулярных материалов, магнитные и спиновые свойства которых могут управляться светом. Исследованы новые системы, в которых к производимым циклопоририна присоединены комплексы с различными ионами. В случае иона меди обнаружен перенос поляризации электронных спинов с триплетного состояния циклопоририна на медную подсистему даже при слабом обменном взаимодействии между подсистемами.

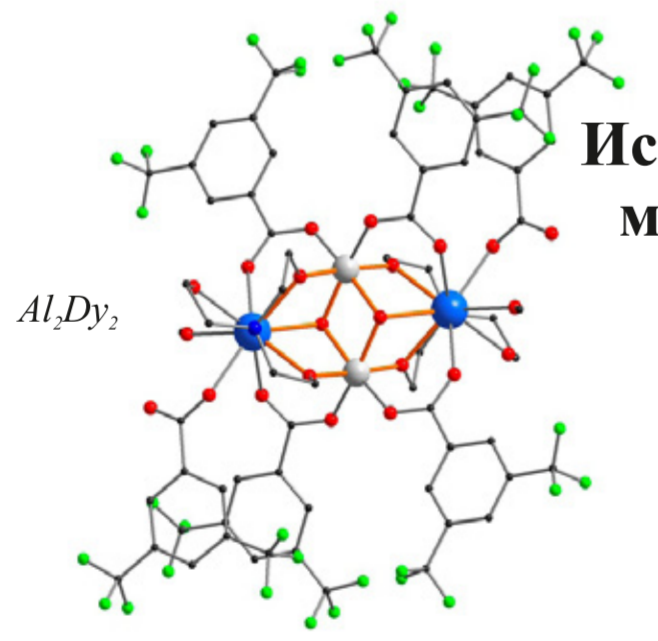
Sukhanov A. A., Konov K. B., Salikhov K. M., Voronkova V. K., Mikhailitsyna E. A., Tyurin V. S. Time-Resolved Continuous-Wave and Pulse EPR Investigation of Photoinduced States of Zinc Porphyrin Linked with an Ethylenediamine Copper Complex. *Appl. Magn. Reson.* 46, 1199-1220, 2015.



Впервые изучены фотовозбужденные состояния фуллеренов с двумя присоединенными бирадиками.

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ МАГНИТЫ

Исследование влияния спин-спиновых взаимодействий на мономолекулярные свойства гетероспиновых кластеров



Для направленного синтеза новых молекулярных магнитов на основе ионов диспрозия необходимо установить взаимосвязь динамики намагниченности с анизотропией локальных свойств ионов диспрозия и спин-спиновыми взаимодействиями в кластерах. Эти вопросы изучаются в КФТИ совместно с учеными из университета Калеруя, Германия (группа проф. А. Powell) на примере ряда родственных четырехядерных кластеров Fe₄Dy₄ и сравнение их свойств с Al₄Dy₄.

БИМОЛЕКУЛЯРНЫЙ СПИНОВЫЙ ОБМЕН

На основе численного моделирования спектров ЭПР спиновых зондов (нитроксильных радикалов) сформулирован алгоритм нахождения константы скорости бимолекулярного спинового обмена с учетом сверхтонкого взаимодействия неспаренного электрона не только с ядрами азота, но и протонами. Алгоритм успешно апробирован в эксперименте.



СОТРУДНИЧЕСТВО

Сотрудники ЛСФСХ выполняют ЭПР исследования для многих лабораторий КФТИ:

- лаборатория молекулярной радиоспектроскопии
- лаборатория физики и химии поверхности
- лаборатория квантовой оптики и информатики
- лаборатория радиационной химии и радиобиологии.

Роль оксида азота в развитии патологий: ишемический инсульт, гипокинезия

Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР) тройных комплексов (DETC)-Fe²⁺-NO был использован в качестве метода регистрации содержания оксида азота (NO) в тканях мозга, сердца и печени здоровых крыс и крыс после моделирования ишемического инсульта. На основе прямых измерений NO методом ЭПР спектроскопии показано, что после возникновения признаков ишемического инсульта уже через 5

ИМПУЛЬСНЫЕ МЕТОДЫ ЭПР

Разработана теория импульсных методов двойного электронного парамагнитного резонанса для групп (два и больше) стабильных свободных радикалов, которые выступают в качестве парамагнитных зондов (меток). Нами последовательным образом учтены перекрытие спектров ЭПР спиновых меток, перекрытие спектров возбуждения СВЧ импульсами при формировании наблюдаемых сигналов в экспериментах по двойному электронному резонансу, а также учтен вклад квадрупольного взаимодействия магнитных ядер ¹⁴N изотопа в наблюдаемый на опыте сигнал двойного электронного резонанса. Полученные результаты позволяют с большей точностью измерять современными методами ЭПР расстояния между спиновыми зондами, пространственную «архитектуру» спиновых меток. Показано, что учет эффектов перекрытия спектров спиновых меток имеет особенно большое значение при исследовании групп из трех и более спиновых меток. Результаты данной работы могут оказать заметное влияние на развитие «ЭПР кристаллографии» биологических систем и других некристаллических объектов.

- K. M. Salikhov, I. Khairuzhdinov, R. B. Zaripov. Three-pulse ELDOR theory revisited. *Appl. Magn. Reson.* 45, 573-619 (2014)
- K. M. Salikhov and I. T. Khairuzhdinov. Four-Pulse ELDOR Theory of the Spin 1/2 Label Pairs Extended to Overlapping EPR Spectra and to Overlapping Pump and Observer Excitation Bands. *Appl. Magn. Reson.* 46, 57-83 (2015).
- Azar Aliabadi, Ruslan Zaripov, Kev Salikhov, Violeta Voronkova, Evgeniya Vavilova, Mohammad A. Abdulmalic, Tobias Ruffer, Bernd Buchner, and Vladislav Kataev. Electron Spin Density on the N-Donor Atoms of Cu(II)-(Bis)oxamidato Complexes As Probed by a Pulse ELDOR Detected NMR. *J. Phys. Chem. B*, (2015) DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b03987

Впервые двухчастотный метод импульсного ЭПР, ДЭЭР-детектируемый ЯМР, применен для определения констант СТВ 4-х ядер азота в окружении иона меди в монокристаллах оксамато комплексов меди. Показано, что данный метод, наряду с импульсным ДЭЭР, позволяет с высокой точностью определять константы СТВ, даже в случае слегка неэквивалентных магнитных ядер (Azar Aliabadi, Ruslan Zaripov и др. *J. Phys. Chem. B*, 119 (2015), 13762 – 13770).

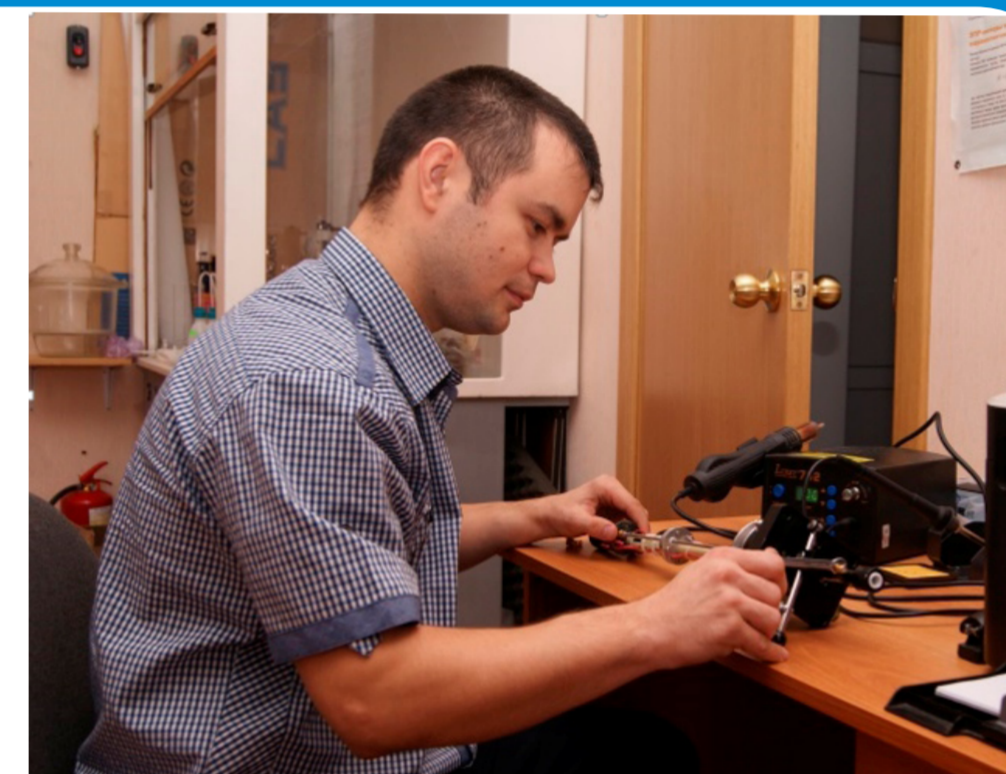


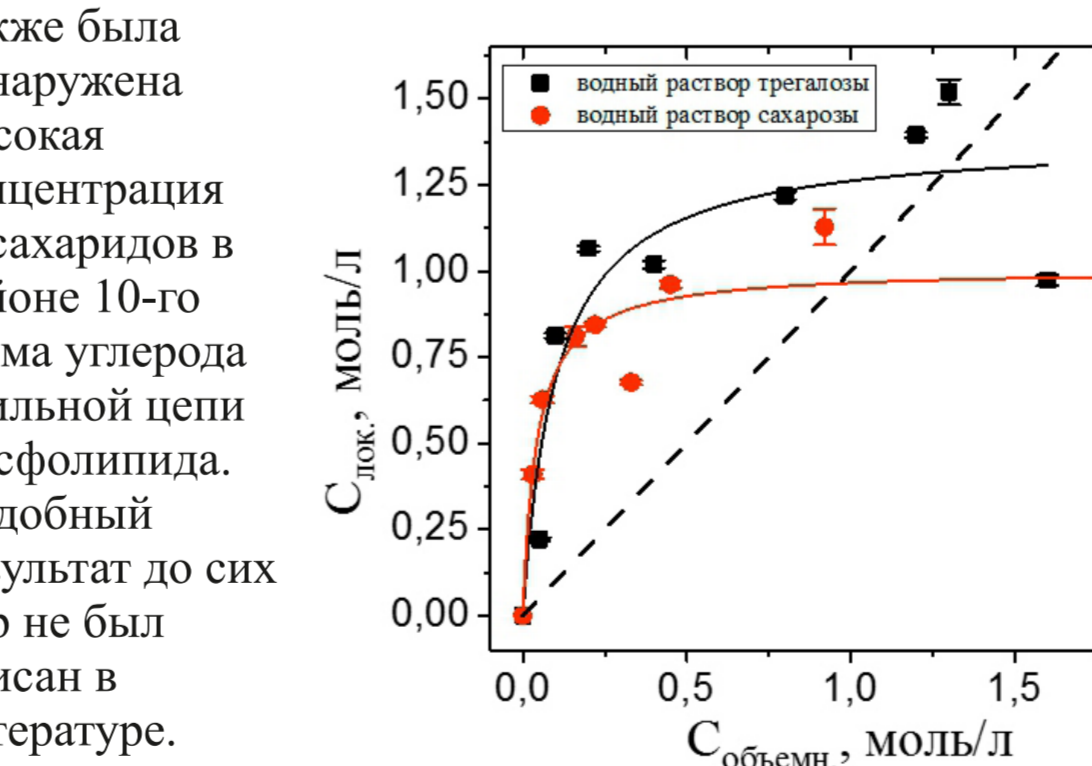
Рисунок. Сравнение экспериментального и моделированного спектров ДЭЭР-детектируемого ЯМР для комплекса меди с этилимиными заместителями. ДЭЭР-детектируемый ЯМР спектр содержит линии как от разрешенных, так и запрещенных переходов. Модель: электронный спин меди S(S+1) = 1/2 взаимодействует с 4 ядрами азота (N=1, and A_N(2) = 48 МГц.

ЭПР В БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЕ

Дисахариды, такие как сахароза и трегалоза, известны своим криоциклическим действием. Целью работы было исследовать особенности взаимодействия молекул дисахаридов с модельной клеточной мембраной. В ходе выполнения работы была обнаружена высокая концентрация молекул дисахаридов около поверхности модельной клеточной мембраны. Высокая концентрация дисахаридов у поверхности мембраны подтверждает широко распространенную в литературе гипотезу вытеснения воды, согласно которой дисахариды вытесняют воду с поверхности мембраны и образуют водородные связи с полярными частями молекул фосфолипидов. Считается, что благодаря прямому взаимодействию молекул дисахаридов и фосфолипидов стабилизируется структура мембраны.



Импульсная последовательность ESEEM, которая использовалась в эксперименте.



Зависимость локальной концентрации дисахаридов около модельной клеточной мембраны от концентрации дисахаридов в объеме воды.

ПУБЛИКАЦИИ

- K.M. Salikhov, I.T. Khairuzhdinov. Four-Pulse ELDOR Theory of the Spin Label Pairs Extended to Overlapping EPR Spectra and to Overlapping Pump and Observer Excitation Bands. *Appl. Magn. Reson.* 44, 8062-8079 (2015)
- Mohammad A. Abdulmalic, Azar Aliabadi, Andreas Petr, Yulia Krupskaya, Vladislav Kataev, Bernd Buchner, Ruslan Zaripov, Evgeniya Vavilova, Violeta Voronkova, Kev Salikhov, Torsten Hahn, Jens Kortus, Francois Eya'ane Meva, Dieter Schaarschmidt and Tobias Ruffer. Magnetic superexchange interactions: trinuclear bis(oxamidato) versus bis(oxamato) type complexes. *Dalton Trans.*, 44, 8062-8079 (2015)
- A. A. Sukhanov, K. B. Konov, K. M. Salikhov, V. K. Voronkova, E. A. Mikhailitsyna, V. S. Tyurin. Time-Resolved Continuous-Wave and Pulse EPR Investigation of Photoinduced States of Zinc Porphyrin Linked with an Ethylenediamine Copper Complex. *Appl. Magn. Reson.* 46, 1190-1220 (2015), DOI 10.1007/s00723-015-0705-0
- Electron Spin Density on the N-Donor Atoms of Cu(II)-(Bis)oxamidato Complexes As Probed by a Pulse ELDOR Detected by NMR/A. Aliabadi, R. Zaripov, K. Salikhov, V. Voronkova, E. Vavilova, M. A. Abdulmalic, T. Ruffer, B. Buchner, and V. Kataev// *J. Phys. Chem. B* 2015. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b03987
- Membrane-Sugar Interactions Probed by Pulsed Electron Paramagnetic Resonance of Spin Labels. K. B. Konov, D. V. Leonov, Nikolay P. Isaev, Kirill Yu. Fedotov, V. K. Voronkova, and Sergei A. Dzuba// *J. Phys. Chem. B*, 2015, DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b06864
- N.M. Selivanova, A.B. Konov, K.A. Romanova, A.T. Gubaidullin, Yu.G. Galyamedinov. Lyotropic La-containing lamellar liquid crystals: phase behaviour, thermal and structural properties. *Soft Matter*, 2015, v. 11, pp. 7809-7816.
- Eremina R.M. Oscillation of the multiferroic/ferroelectric GdMnO₃/SrTiO₃ and YbMnO₃/SrTiO₃ interfaces in the EPR spectrum / R. M. Eremina, T. P. Gavrilova, I. I. Fazlizhanov, I. V. Yatsyk, D. V. Mamedov, A. A. Sukhanov, V. I. Chichkov, N. V. Andreev, H.-A. Krug von Hidda, A. Loidl // *Low Temperature Physics* V. 41, N 1, 2015, P. 43-46.
- Ivanshin, V. A., Litvinova, T. O., Gimranova, K., Sukhanov, A. A., Jia, S., Bud'ko, S. L., & Canfield, P. C. (2015, March). Dual nature of 3d electrons in YbT₂Zn₂₀ (T= Co; Fe) evidenced by electron spin resonance. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 592, No. 1, p. 012084). IOP Publishing.
- Youn, S., Sukhanov, A., & Han, O. (2015). Binding of Imidazole Stabilizes Low Spin State of Heme Iron in Dual Substrate Specific Rice Allene Oxide Synthase 1. *Bulletin of the Korean Chemical Society*, 36(8)
- Особенности спин-переменных свойств [Fe(acen)pic₂]BPh₄ nH₂O / Т.А. Иванова, И.В. Овчинников, И.Ф. Гильмутдинов, Л.В. Мингадиева, О.А. Туранова, Г.И. Иванова // ФТТ, 2016, том 58, вып.2, с. 273 – 276.
- Р. Галеев. Проявление антипересечения уровней энергии в спектрах ЭПР спиновых кластеров. ФТТ. (В печати)
- Андрианов В.В., Гайнутдинов Х.Л. Модель пластичной нейронной сети оборонительного поведения виноградной улитки на основе спайковых формальных нейронов с формальной активностью. *Нейрокомпьютеры: разработка, применение*. 2015. № 4. С. 15-17.
- Andrianov V.V., Bogodvid T.Kh., Deryabina I.B., Golovchenko A.N., Muranova L.N., Tagirova R.R., Vinarskaya A.Kh., Gainutdinov Kh.L. Modulation of defensive reflex conditioning in snails by serotonin. *Frontiers in Behavioral Neuroscience*, 2015, v.9, Article 279, p. 1-12.

КОНФЕРЕНЦИИ

- International Workshop "Modern Development of Magnetic Resonance", 22 -26 September 2015, Kazan, Russia- **11 докладов**
- International Conference «Spin physics, spin chemistry and spin technology»(SPCT-2015) June 1-5, 2015 St. Petersburg, Russia - **9 докладов**,
- Совещание по физике низких температур. Казань, 29 июня-3 июля 2015г. - **3 доклада**
- Всероссийская конференция «Структура и динамика молекулярных систем» 29 июня – 3 июля 2015 г. г. Йошкар-Ола (Россия) — **2 доклада**
- XXVII Симпозиум «Современная химическая физика» - 20 сентября - 1 октября 2015 года, пансионат «Маяк» г. Туапсе, Россия. - **1 доклад**
- Конференция "Молодежь и инновации Татарстана" - **3 доклада**
- 11-й Международный междисциплинарный конгресс "Нейронаука для медицины и психологии", 2-12 июня 2015 г. г. Судак - **2 доклада**

