

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М. В. Ломоносова

XXX Международная конференция
студентов, аспирантов и молодых ученых
по фундаментальным наукам



Международный
молодежный научный форум

“ЛОМОНОСОВ–2023”

Секция **“ФИЗИКА”**

Подсекция
“МОЛЕКУЛЯРНАЯ ФИЗИКА”,

Сборник тезисов докладов

МОСКВА
Физический факультет МГУ
2023

XXX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам «Ломоносов—2023». Секция «Физика». Сборник тезисов. — М. Физический факультет МГУ, 2023, 1052 с.

ISBN 978-5-8279-0255-3

Секция «Физика» включает следующие подсекции

1. Акустика
2. Астрофизика
3. Атомная и ядерная физика
4. Биофизика
5. Геофизика
6. Математика и Информатика
7. Математическое моделирование
8. Медицинская физика
9. Молекулярная физика
10. Нелинейная оптика
11. Оптика
12. Радиофизика
13. Сверхпроводящие и электронные свойства твердых тел
14. Твердотельная наноэлектроника
15. Теоретическая физика
16. Физика космоса
17. Физика магнитных явлений
18. Физика твердого тела
19. Школа МГУ «Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина»:
 - Квантовые технологии
 - Фотонные технологии
 - Цифровая медицина

ISBN 978-5-8279-0255-3

© Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2023 г.

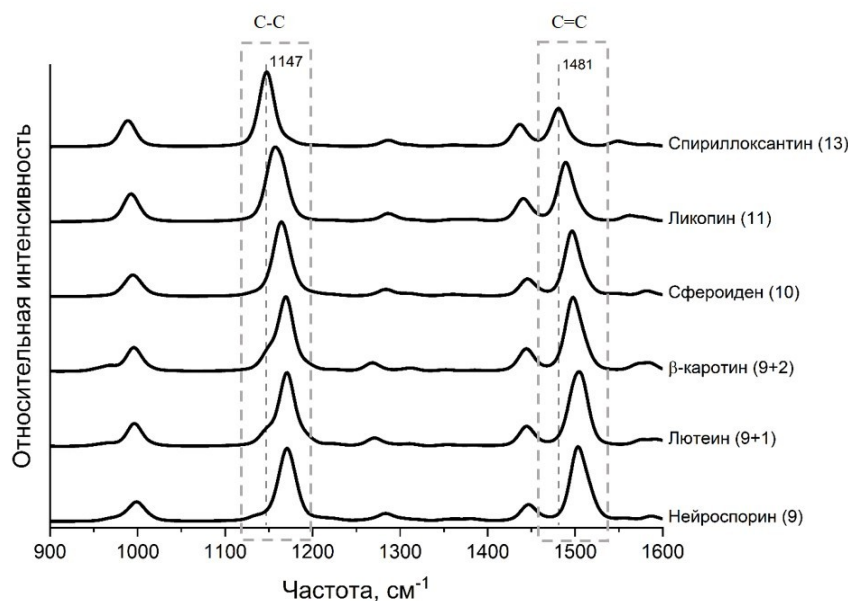


Рис. 2. Рассчитанные спектры КР спириллоксантина, ликопина, сфероидена, β -каротина, лютеина и нейроспорина.

Автор выражает благодарность Межведомственному суперкомпьютерному центру Российской академии наук за предоставленные вычислительные ресурсы.

Литература

1. Darvin, M.E., Sterry, W., Lademann, J. and Vergou, T. The role of carotenoids in human skin // *Molecules*. 2011. V. 16 (12). P. 10491-10506.
2. Chi S.C., et al. Assembly of functional photosystem complexes in *Rhodobacter sphaeroides* incorporating carotenoids from the spirilloxanthin pathway // *Biochim Biophys Acta*. 2015. V. 1847 (2). P. 189-201.
3. Stanley L., Yuan YW. Transcriptional Regulation of Carotenoid Biosynthesis in Plants: So Many Regulators, So Little Consensus // *Front Plant Sci*. 2019. V. 10. P. 1017.
4. Laikov, D.N. Fast evaluation of density functional exchange-correlation terms using the expansion of the electron density in auxiliary basis sets // *Chemical Physics Letters*. 1997. V. 281 (1–3). P. 151-156.

ДИНАМИКА ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В ВОДЕ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ: ПЕРЕХОД «ЖИДКОСТЬ-ЖИДКОСТЬ»

Власов Р.В., Мокшин А.В.

Казанский (Приволжский) ФУ, Институт физики, Казань, Россия
E-mail: roman.vlasoff@outlook.com

Концепция существования в жидкости различной структуры ближнего порядка, между которыми происходят переходы, появилась более 30 лет назад [1, 2]. Так область на фазовой диаграмме, соответствующая жидкой фазе, разделяется на подобласти низкой и высокой плотности, называемые LDL (low density liquid) и HDL (high density liquid) фазами соответственно [3, 4]. И переходу «жидкость-жидкость» соответствует фазовое превращение из состояния LDL в состояние HDL при увеличении давления. Результаты экспериментов и молекулярно-динамических расчетов показывают, что при переходе «жидкость-жидкость» многие параметры жидкости изменяются плавно и без скачков, но существенным образом [4, 5].

Данный переход наблюдается и в такой простой жидкости как вода. Естественно предположить, что динамика воды, в частности динамика формирования водородных связей, будет отличаться в фазах LDL и HDL. Так в рамках молекулярной динамики

обнаружено, что переход наблюдается на изотерме $T = 293$ К при давлениях $p_{LL} \sim 300$ - 380 МПа. Установлено, что состоянию воды в фазах LDL и HDL соответствуют два динамических режима. Согласно результатам исследования, в области LDL водородные связи в среднем существуют дольше, чем в области HDL. Увеличение давления способствует изменению структуры ближнего порядка в воде, что приводит к уменьшению среднего времени жизни ВС $\langle \tau_{HB} \rangle$ в фазе LDL до перехода в фазу HDL, где структура перестает изменяться и уменьшение $\langle \tau_{HB} \rangle$ практически прекращается (Рис. 1).

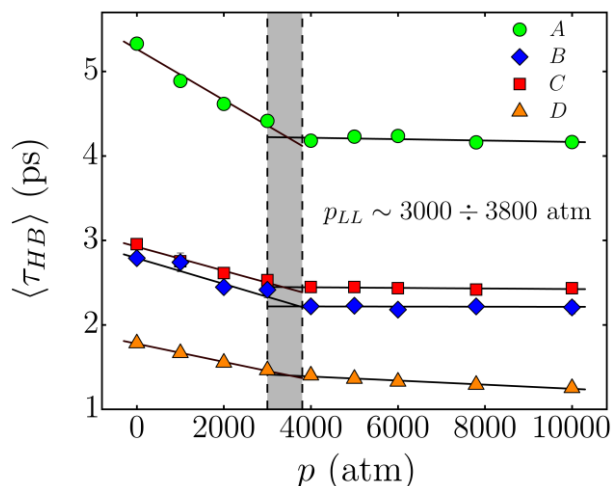


Рис. 1. Зависимость среднего времени жизни водородных связей от давления на изотерме 293 К; A-D соответствуют различным методам вычисления

Также установлено, что при переходе «жидкость-жидкость» наблюдаются изменения в таких параметрах как среднее время жизни координированности молекулы воды $\langle \tau_N \rangle$, средний угол водородной связи $\langle \beta_{HB} \rangle$, коэффициенте самодиффузии D_s и других динамических параметрах.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 19-12-00022).

Литература

1. Бражкин В.В. и др. Квазипереходы в простых жидкостях при высоких давлениях // Успехи физических наук. 1999. Т. 169. С. 1035-1039.
2. Poole P.H. et al. Phase behaviour of metastable water // Nature. 1992. Vol. 360. P. 324-328.
3. Brazhkin V.V., Lyapin A.G. High-pressure phase transformations in liquids and amorphous solids // Journal of Physics: Condensed Matter. 2003. Vol. 15. С. 6059–6084.
4. Tanaka H. Liquid-liquid transition and polyamorphism // The Journal of Chemical Physics. 2020. Vol. 153. P. 130901.
5. Fanetti S. et al. Structure and dynamics of low-density and high-density liquid water at high pressure // The Journal of Physical Chemistry Letters. 2014. Vol. 5. С. 235-240.

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ НУКЛЕОИД-АССОЦИИРОВАННЫХ БЕЛКОВ INF И HU МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

Гордиенко А.М.^{1,2}, Петухов М.В.^{2,3}, Дадинова Л.А.², Штыкова Э.В.²

¹МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

²Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва, Россия

³ИФХиЭ им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия

E-mail: alex.gor99@mail.ru

Изучение бактериальных нуклеоид-ассоциированных белков (NAP) играет важнейшую роль в организации, репликации и экспрессии бактериальных хромосом [1]. В