



Фото предоставлено МТЦ СО РАН

Алексей Кирютин и Иван Жуков.

“
Благодаря гранту
Российского
научного фонда
удалось создать
и апробировать
уникальную
установку
получения
сигналов ЯМР
с высоким
спектральным
разрешением
и применением
переключения
магнитного
поля. Подобную
установку только
сейчас пытаются
повторить
в Великобритании.

Два импульса для триады

- Химики-органики из Университета Вюрцбурга синтезировали триадные молекулы, состоящие из донора электронов, жесткого молекулярного мостика и акцептора электронов, - рассказывает главный научный сотрудник МТЦ СО РАН, доктор физико-математических наук Никита ЛУКЗЕН. - После возбуждения лазерным импульсом донор отдает свой электрон акцептору. В обычном земном магнитном поле время жизни такой радикальной пары составляет около 0,5 микросекунды и завершается рекомбинацией (обратным переносом электрона). Увеличивая магнитное поле до 2 Тесла, мы продлеваем жизнь пары в 80 раз - до 40 микросекунд, что дает возможность ее исследовать. После первого импульса квантовые биения (чередование синглетных и триплетных состояний) по-прежнему неразличимы, но Ульрих Штейнер из университета Констанца и Кристоф Ламберт из университета Вюрцбурга предложили добавить в методику второй лазерный импульс через некоторое время после первого, приводящий радикалы в еще более возбужденное состояние. Это дает возможность обнаружить и зафиксировать осцилляции. Я вместе с Ульрихом Штейнером разработал теорию метода и затем сравнил расчеты с экспериментом. В публикации наш метод был назван rumpush-спектроскопией (rumpush - «накачка - толчок»). Такой принцип управления фоторазделением зарядов может найти практическое применение в органической фотовольтаике. Кроме

того, изучая осцилляции, можно понять, как создавать и обнаруживать когерентность, присущую квантовым явлениям.

Что интересно, впервые чередование синглетных и триплетных состояний при радиационном воздействии на неполярные растворы было обнаружено в 1983 году в Новосибирском Академгородке. Эксперимент поставил академик Юрий Молин (Институт химической кинетики и горения СО РАН) с коллегами. Одним из соавторов статьи был Н.Луцен. Однако «поймать» осцилляции в фотохимических экспериментах до сих пор никому не удавалось.

- Такие исследования - прямой путь к спинтронике и созданию «умных» материалов, - считает директор МТЦ СО РАН профессор РАН Матвей Федин. - Вместе с коллегами из Института проблем химической физики РАН (Черноголовка), Института общей и неорганической химии РАН (Москва), Института физической химии и электрохимии РАН (Москва) и Южного федерального университета (Ростов) мы участвуем в проекте-стоимиллионнике Министерства науки и высшего образования РФ «Фундаментальные основы спинновых технологий и направленного конструирования «умных» полифункциональных материалов для спинтроники и молекулярной электроники».

Как улучшить МРТ

Химически индуцируемая динамическая поляризация ядер - один из основных методов спиновой химии, который применяется для существенного усиления сигнала ЯМР. Получение изображений оптически непрозрачных объектов с помощью МРТ - чрезвычайно информативный метод, особенно для медицинской диагностики. Однако пространственное разрешение и чувствительность МРТ необходимо повышать, чтобы пациентам не приходилось лежать в томографе по 20-30 минут.

- В чем причина низкой скорости получения МРТ-изображений по сравнению с более быстрой компьютерной томографией (КТ)? Контраст в МРТ-изображениях строится на различии релаксационных свойств спинов ядер водорода, а энергия взаимодействия этих спинов с магнитным полем очень мала, поэтому даже в сильном магнитном поле разница в количестве ядерных спинов протонов, выстраиваемых по полю и против него, крайне незначительна: это примерно 1 на 100 тысяч, - поясняет заведующая лабораторией фотохимических реакций МТЦ доктор физико-математических наук Александра ЮРКОВСКАЯ. - Но только эта разница и обеспечивает полезный сигнал. Использование спиновой гиперполяризации дает возможность увеличить сигнал и, как следствие, чувствительность ядерного магнитного резонанса в тысячи и десятки тысяч раз. На Западе для создания гиперполяризации развивается подход, основанный на использовании очень дорогого и технологически сложного оборудования - достаточно

Из первых рук

Ольга КОЛЕСОВА

Управляя полями

Новые горизонты спиновых технологий открывают в Новосибирске



Никита ЛУКЗЕН,
главный научный сотрудник
МТЦ СО РАН, доктор физико-
математических наук



Александра ЮРКОВСКАЯ,
заведующая лабораторией
фотохимических реакций МТЦ,
доктор физико-математических наук

► Все фотохимические процессы приводят к образованию свободных радикалов. Например, мы загораем, а под действием солнечного света в нашем теле создаются свободные радикалы биомолекул, разрушая ДНК. Радикальные пары - объект спиновой химии, достаточно новой науки, имеющей сибирские корни. Основатель Международного томографического центра (МТЦ) СО РАН академик Ренад Сагдеев был в числе

лауреатов Ленинской премии, полученной в 1986 году «за открытие магнитных и спиновых эффектов в химических реакциях». Спины неспаренных электронов в радикальных парах могут находиться в синглетном (разнонаправленном) или триплетном (сонаправленном) состоянии. Взаимодействуя с магнитными полями, радикалы иногда меняют ориентацию спина, то есть переходят из синглетного состояния в триплетное и

наоборот. Такие чередования (осцилляции) теоретически известны, но различить их оптическими методами при фотохимическом воздействии было невозможно до создания специальной методики, предложенной сотрудниками МТЦ СО РАН в соавторстве с учеными университетов Констанца и Вюрцбурга (Германия), о чем в декабре 2021 года появилась публикация в журнале Science ([www.science.org/doi/10.1126/science.abc4254](https://doi.org/10.1126/science.abc4254)).

медленный и трудоемкий метод динамической поляризации ядер (ДПЯ). Мы развиваем существенно более дешевые и простые методы, основанные на создании химически индуцированной поляризации в обратимых фотореакциях с участием биомолекул, и методы, основанные на использовании параводорода - долгоживущего ядерного спинового изомера молекулы водорода.

Работы стартовали в 2014 году благодаря гранту Российского научного фонда «Химическая и спиновая динамика формирования спиновой гиперполяризации в методе SABRE». Тогдашний директор МТЦ СО РАН Константин Львович Иванов, к сожалению, безвременно ушедший из жизни год назад, сумел собрать команду молодых ученых и инициировать работу над уникальной установкой. Подобную установку только сейчас пытаются повторить в Великобритании, причем назвали проект «Иванов-шаттл» в честь Константина Львовича.

- Нам удалось создать и апробировать не имеющую аналогов установку получения сигналов ЯМР с высоким спектральным разрешением и применением

переключения магнитного поля, - рассказывает А.Юрковская. - Мы научились варьировать магнитное поле на 9 порядков - от 10 Тесла до 5 наноТесла. Принцип работы этой установки состоит в прецизионном позиционировании и механическом перемещении ампулы с образцом вдоль оси соленоида сверхпроводящего магнита. В установку мы добавили многослойный «магнитный экран». С его помощью мы можем изучать движения спинов в ультраслабом поле, где спиновый порядок и поляризация различных типов ядер сохраняется гораздо дольше (разработчик установки кандидат химических наук Алексей Кириутин). В 2021 году мы запатентовали новый метод получения многомерных корреляционных спектров ЯМР для ядер разного типа в ультраслабом магнитном поле, применяя магнитные поля, которые в тысячу раз слабее земного. Реализовал новый метод тогда еще аспирант, а сейчас уже кандидат физико-математических наук Иван Жуков.

Продолжить работы и совершенствовать методику позволили международный проект РНФ и DFG (Deutsche

Forschungsgemeinschaft, Немецкое научно-исследовательское сообщество) «Развитие и применение новых методов усиления сигналов ЯМР с использованием параводорода» (2019-2021 годы). Были разработаны методы, с помощью которых поляризацию протонов можно переносить на другие полезные ядра, например, на изотоп углерода C-13, и получать информацию с помощью МРТ о функциональных процессах, отслеживая трансформацию углеродного скелета молекул в ходе биохимических реакций. Это может дать старт новым научным направлениям.

В рамках российско-немецкого проекта И.Жуков и А.Кириутин построили демонстрационный образец установки переключения полей в Дармштадском техническом университете, но всех секретов не раскрыли. Работающий в ультраслабом поле прибор по-прежнему есть только в Новосибирске.

- В июне 2021 года у нас началась поддержанная мегагрантом от Минобрнауки работа над проектом «Ядерная поляризация в многократно переключаемых магнитных полях», проведением

исследований руководит ведущий французский ученый Джеффри Боденхаузен (Ecole normale supérieure - Высшая нормальная школа, Париж), ученик Нобелевского лауреата Рихарда Эрнста (премия присуждена за разработку многомерных методов ЯМР), - продолжает А.Юрковская. - Одна из задач проекта связана с созданием так называемых долгоживущих спиновых состояний, зависимость времени жизни которых от магнитного поля будет использована для скрининга лекарств (с помощью методов гиперполяризации).

Наша установка крайне актуальна для создания сложных схем манипулирования ядерной поляризацией. Отрабатывая все эти методы в лабораторных условиях, мы сможем повысить информативность магнитно-резонансной томографии для практической медицинской диагностики. В частности, будем иметь возможность следить в реальном времени за определенными метаболическими процессами, происходящими в раковой опухоли, и таким образом осуществлять контроль воздействия на нее лекарственных препаратов. Вместе

с Джеффри Боденхаузеном, признанным «гуром ЯМР» и одним из авторов настольной книги каждого специалиста нашего профиля о ядерно-магнитном резонансе, мы организуем образовательные поездки для молодых исследователей. Более того, подписали соглашение об обмене студентами и создании совместной аспирантуры между МТЦ, Новосибирским государственным исследовательским университетом и Высшей нормальной школой Парижа при поддержке правительства Франции. Один из моих аспирантов - Богдан Родин - сейчас проводит исследования в области ДПЯ в Париже.

- Развитие наших исследований идет поступательно, - констатирует директор МТЦ СО РАН М.Федин. - От фундаментальных грантов РНФ мы перешли к более прикладным мегагрантам, ведущим к новым технологиям и материалам. Важно, что в коллективе каждого проекта до 70% составляют молодые ученые. Наш институт был и остается одним из самых «молодежных» в СО РАН. Это дает уверенность в том, что сибирская спиновая химия по-прежнему будет задавать тон в мире. ■

Лабораторная работа

Сильна в дерматологии

К диагностике кожных заболеваний подключили нейросеть

Пресс-служба СКФУ

► Десять видов новообразований кожи может определить нейросетевая система, созданная математиками Северо-Кавказского федерального университета (СКФУ). Это диагностика гораздо точнее, чем у существующих аналогов. Система базируется на анализе различных общих и дерматологических данных о пациентах: возраст, пол, расположение пигментного новообразования на теле...

Как считает заведующий кафедрой математического моделирования СКФУ кандидат физико-математических наук, доцент Павел Ляхов, использование разнородной информации при создании интеллектуальных систем диагностики за счет поиска

связей между визуальными объектами исследований и статистическими метаданными позволяет значительно повысить точность классификации. Это очень важно в поддержке принятия решений специалистами, медиками и клиницистами.

Созданная мультимодальная система научилась распознавать такие пигментные поражения кожи, как дерматофиброма, невус, солнечное лентигно, разные виды кератоза, меланома, и другие виды рака кожи. Наибольшая точность распознавания пигментных новообразований кожи составила 83,6% - это значительно выше, чем при визуальной постановке диагноза медиками-дерматологами.

- Данная разработка позволит минимизировать влияние цело-



веческого фактора, поможет в принятии точных врачебных решений, расширит возможности раннего выявления рака кожи, - говорит ректор СКФУ Дмитрий Беспалов. - Уверен, что это исследование - хороший научный

задел для использования предложенного метода в медицине.

Ученые планируют на основе разработки создать мобильное приложение, с помощью которого любой желающий сможет проверить себя на наличие по-

добных поражений кожи и при необходимости своевременно обратиться за медицинской помощью. Исследователи также рассматривают варианты применения системы и в других областях медицины. ■

ПОДПИСКА-2022

Дорогие читатели!

Продолжается подписка на второй полугодие 2022 года. Вы легко найдете «Поиск» в каталогах агентств «Почта России», «Пресса России» и «Урал-Пресс».

Наши подписные индексы

«Почта России»	П 1889
«Пресса России»	43298
«Урал-Пресс»	29855 - подписка на полугодие 19021 - годовая подписка