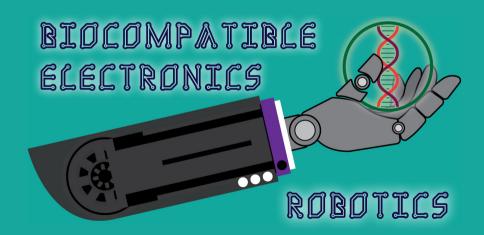
# IV Всероссийская школаконференция с международным участием по биосовместимой электронике и робототехнике

# Книга тезисов



29 июня-3 июля, 2025 Псков Россия Псковский Государственный Университет https://biocer.ru/

# IV Всероссийская школа-конференция с международным участием по биосовместимой электронике и робототехнике – 2025

### Организаторы

Министерство Науки и Образования Российской Федерации

Российская Академия Наук

Факультет Фундаментальной Физико-Химической Инженерии МГУ им. М.В.Ломоносова

Инженерная Школа МГУ

Псковский Государственный Университет

Институт Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова Российской Академии Наук (ИСПМ РАН)

Научный Совет РАН по ВысокоМолекулярным Соединениям

### Тематики школы-конференции

- 1) Биосовместимые/биодеградируемые материалы для ортопедии, хирургии и протезирования
- 2) Функциональные материалы для протезирования/восстановления функций глаза
- 3) Полимеры и композиты для актюаторов и сенсоров (искусственная мышца, искусственная кожа), в т.ч. с функциями самозалечивания
- 4) Биосовместимые электронные устройства для диагностики и лечения различных заболеваний человека и животных
- 5) Электронные устройства для протезирования и/или создания искусственных органов обоняния (электронный нос, электронный язык)
- 6) Подходы к развитию искусственного интеллекта, нейросетей, анализу больших данных, машинному обучению для использования в робототехнике и биоэлектронике

### Председатель школы-конференции

д.х.н. академик РАН Юлия Германовна Горбунова (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской Академии Наук, Россия)

### Заместитель Председателя школы-конференции

д.х.н. Елена Валериевна Агина (Институт Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова Российской Академии Наук, Россия)

### Программный комитет

д.х.н. академик РАН Юлия Германовна Горбунова (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской Академии Наук, Россия)

д.х.н. Елена Валериевна Агина (Институт Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова Российской Академии Наук, Россия) д.х.н. академик РАН Азиз Мансурович Музафаров (Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской Академии Наук, Россия)

д.х.н. член-корр. РАН Сергей Анатольевич Пономаренко (Институт Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова Российской Академии Наук, Россия)

д.х.н. член-корр. РАН Сергей Николаевич Чвалун (Институт Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова Российской Академии Наук, Россия)

д.ф-.м.н. Елена Юльевна Крамаренко (Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Россия)

к.х.н. Александра Александровна Калинина (Институт Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова Российской Академии Наук, Россия)

### Организационный комитет

д.х.н. Ольга Александровна Серова – *Председатель* к.х.н. Аскольд Альбертович Труль – *ученый секретарь* 

к.ф.-м.н. Ирина Рашитовна Насимова

к.х.н. Виктория Петровна Гайдаржи

Программа

### Воскресение, 29<sup>е</sup> июня

-					
08:20 - 8:30	Прибытие на вокзал Пскова				
8:30 – 9:30	Завтрак с остановкой в гостинице, чтобы оставить вещи				
9:30 – 15:30	Экскурсия Изборск и Печоры				
15:30 – 17:30	Заселение в гостиницу / Свободное время				
17:30 – 18:00	Открытие Школы-конференции. Приветственное слово принимающей стороны.				
18:00 – 18:45	<u>Л-1</u> . <i>Азиз Музафаров</i> . Фундаментальные Проблемы Химического и Полимерного Образования, в Частности, по Материалам Статьи «История Одной Концепции»				
18:45 – 19:30	<u>Л-2</u> . <i>Юлия Горбунова</i> . Фотодинамическая Терапия: Достижения, Догмы, Противоречия и Перспективы				

### Понедельник, 30<sup>е</sup> июня

	Председатель сессии: Юлия Горбунова				
9:00 – 9:45	<u>Л-3</u> . <i>Елена Крамаренко</i> . Функциональные Полимерные Материалы: Получение, Свойства и Применение				
9:45 – 10:30	<u>Л-4</u> . <i>Елена Агина.</i> Функциональные Материалы для Жидкостных Биосенсоров на Основе Органических Электролитических Транзисторов				
10:30 - 11:00	<u>У-1</u> . <i>Елена Пойманова</i> . Мультипараметрическое Детектирование с Помощью Аптасенсора на Основе Органических Полевых Транзисторов с Электролитическим Затвором				
11:00 – 11:30	<u>Кофе-брейк</u>				
	Председатель сессии: <i>Елена Агина</i>				
11:30 – 12:00	<u>У-2</u> . <i>Аскольд Труль</i> . Механизм Работы Сенсорных Устройств на Основе Органических Полевых Транзисторов				
12:00 – 12:30	<u>У-3</u> . Валерий Кривецкий. Рабочая Температура Газового Сенсора в Качестве Входного Параметра Нейросетевых Алгоритмов для Определения Сверхмалых Концентраций				
12:30 – 12:50	<u>У-4</u> . <i>Антон Абрамов</i> . Электронный Нос на Основе Полупроводниковых Сенсоров для Классификации Широкого Спектра Газовых и Жидкостных Смесей				
12:50 – 13:05	<u>У-5</u> . <i>Полина Шапошник.</i> Новые Материалы для Органических Полевых Транзисторов на Основе Полисилоксанов с Привитыми ВТВТ-Группами				
13:05 – 13:20	<u>У-6</u> . <i>Данила Красников</i> . Коррекция Дрейфа Базовой Линии для Газовых Сенсоров на Основе ОПТ и МОП				

13:20 – 13:35	<u>У-7</u> . Станислав Мельников. Разработка Подхода к Калибровке Сенсоров с Металло-Оксидной Пленкой (МОП-Сенсоров) для Использования их в Диагностике Заболеваний по Составу Выдыхаемого Воздуха			
13:35 – 14:30	Обед			
	Председатель сессии: Елена Крамаренко			
14:30 – 15:15	<u>Л-5</u> . <i>Елена Завьялова.</i> Аптасенсоры: Тест-Системы, Устройства и Подходы для Усиления Сигнала Сенсоров			
15:15 – 16:00	<u>Л-6</u> . <i>Таймураз Худалов.</i> Актуальность и Перспективы Биосенсоров в Травматологии-Ортопедии			
16:00 – 16:30	<u>У-8.</u> Газинур Таиров. Перспективы Применения Биосенсоров в Хирургии Позвоночника			
16:30 – 17:00	Кофе-брейк			
	Председатель сессии: Елена Завьялова			
17:00 – 17:15	<u>У-9</u> . <i>Елена Кретова</i> . Создание Биорецепторного Слоя с Помощью Методов «Клик»-Химии на Поверхности Органических Полевых Транзисторов с Электролитическим Затвором			
17:15 – 17:30	<b>У-10</b> . Анна Кешек. Конформационные Переходы і-мотива как Основа для Биосенсора к Нескольким Аналитам			
17:30 – 17:45	<u>У-11</u> . <i>Богдан Кулешов</i> . Применение Краун-Эфиров для Детектирования Ионов Металлов при Помощи Органических Электролитических Транзисторов			
17:45 – 18:00	<u>У-12</u> . <i>Ярослава Титова</i> . Новый Подход к Функционализации Активного Слоя на Основе PEDOT:PSS для Создания Биосенсоров			
18:00 – 18:15	<u>У-13</u> . Дмитрий Скворцов. Сенсор на Ртуть на Основе Органического Полевого Транзистора с Электролитическим Затвором и Аптамеров			
18:15 – 18:30	<u><b>У-14</b></u> . <i>Валерий Нагорный.</i> Электрические и Сенсорные Свойства Производных Тиофен-Фенилена			

## Вторник, 1<sup>е</sup> июля

9:00 – 17:30	Экскурсия в Михайловское, Пушкинские Горы
18:00 – 19:00	Стендовые доклады

## Среда, 2<sup>е</sup> июня

	Председатель сессии: Дмитрий Телышев
9:00 – 9:45	<u>Л-7</u> . <i>Юрий Лупоносов.</i> Органические Сопряженные Молекулы Донорно- Акцепторного Типа для Биоэлектроники и Фототерапии
9:45 – 10:30	<u>Л-8</u> . <i>Мария Калинина</i> . Сенсибилизированные 2D Платформы для Регистрации Раман-Неактивных Соединений

10:30 – 11:00	У-15. Александра Звягина. Ультратонкие Покрытия на Основе Оксида Гр. и Наночастиц Золота для Спектроскопии Гигантского Комбинационного Рассеяния				
11:00 – 11:30	Кофе-брейк				
	Председатель сессии: Юрий Лупоносов				
11:30 – 12:00	<u>У-16</u> . <i>Александра Калинина</i> . Перспективы Бесхлорной Химии Силиконов для Применения в Микроэлектронике и Робототехнике				
12:00 – 12:30	<u>У-17</u> . Вадим Крылов. Дизайн Биораспознающих Поверхностей для Применения в Сенсорах для Обнаружения Грибковых Патогенов				
12:30 – 12:45	<u>У-18</u> . <i>Екатерина Иванова.</i> Получение Полисилоксанов с Полярными Группами				
12:45 – 13:00	<u>У-19</u> . <i>Егор Горшков</i> . Фотоинициаторы на Основе Фталоцианинатов Фосфора(V) для in Situ Фотосшивки Биосовместимых Полимеров				
13:00 – 13:15	<u>У-20</u> . <i>Анастасия Белова</i> . Синтез Соединений на Основе Силоксанов Различной Архитектуры и Органических Флуорофоров и их Применение в Качестве Сенсоров и Флуоресцентных Меток				
13:30 – 14:30	Обед				
	Председатель сессии: Мария Калинина				
14:30 – 15:15 <u>Л-9</u> . <i>Алексей Шайтан.</i> Методы Искусственного Интеллекта в Диза Биополимеров					
15:15 – 16:00	<u>Л-10</u> . Дмитрий Телышев. Устройство для Регенерации Периферических Нервов на Основе Органических Полупроводников				
16:00 — 16:30 <u>У-21</u> . <i>Александр Герасименко</i> . Биоэлектронные Интерфейсы на Основе Лазерно-Индуцированных Гибридов Углеродных Наноматериалов					
16:30 — 17:00 <u>Кофе-брейк</u>					
	Председатель сессии: Алексей Шайтан				
17:00 – 17:30	<u>У-22</u> . Владислав Пойманов. Прогнозирование Заболеваемости Туберкулезом на Основе Количественного Анализа Выдыхаемого Воздуха				
17:30 – 18:00	<u>У-23</u> . Никита Дубинец. Многомасштабное Моделирование в Органических Супрамолекулярных Системах				
18:00 — 18:15 <u>У-24.</u> <i>Елизавета Богданова.</i> Предсказание Аффинности Белок-Белковых Взаимодействий с Использованием Нейросетевого Алгоритма ProbAN					

# Четверг, 3<sup>е</sup> июня

9:00 – 10:00	Выселение из гостиницы
10:00 – 12:00	Круглый стол по итогам заседаний

12:00 – 12:30	Закрытие школы-конференции
12:30 – 13:30	Обед
13:30 – 17:00	Обзорная экскурсия по Пскову с посещением Кремля

### Стендовые доклады

# Понедельник, 1<sup>е</sup> июля, 18:00

Леван Ичкитидзе	П1	Композитные Наноматериалы для Биомедицины	
Михаил Савельев	П2	Нейроинтерфейс на Основе Электропроводящих Биополимеров Полученный Методом Фотолитографии	
Алина Хмельницкая	П3	Получение Цианосодержащих ПДМС в Качестве Диэлектрических Эластомеров	

# Пленарные лекции

#### Фундаментальные Проблемы Химического и Полимерного Образования, в Частности, по Материалам Статьи «История Одной Концепции»

С.Н. Чвалун<sup>1</sup>, М.А.Щербина<sup>1</sup>, А.В.Быстрова<sup>1\*</sup>, <u>А.М. Музафаров</u><sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт синтетических полимерных материалов им.Н.С.Ениколопова РАН

\*e-mail: <u>a.bystrova@gmail.com</u>

Статья посвящена разработке документа «Концепция РАН решения проблемы утилизации полимерных отходов и очистки мирового океана», под эгидой Научного совета по высокомолекулярным соединениям ОХНМ РАН». Финальная версия документа состоит из семи разделов и изложена на восьми страницах печатного текста в формате А4.

Первая версии концепции называлась «Апология полимеров» и была призвана привлечь внимание полимерной и химической общественности к угрозе принятия решений на уровне ООН, направленных на последовательный запрет производства многих видов полимеров, развертывание пропаганды об угрозе полимерных отходов нормальному функционированию мирового океана, возвращение к бумажной и стеклянной упаковке пищевых форм. Высокий статус и явная полимерная безграмотность документа такого уровня находились в явном противоречии и казалось стоит только произнести, как в сказке Андерсена, «а король то голый» весь этот морок рассеется.

Остановить негативное развитие полимерной повестки можно лишь консолидировав мнение независимых стран, заинтересованных в объективном развитие мировой полимерной науки и технологий во всей их полноте. В этом плане Концепция ориентирована прежде всего на страны БРИКС.

Для консолидации здоровых сил нужен документ, с одной стороны демонстрирующий всю ошибочность проводимой политики комиссией UNEP, а с другой, содержащий позитивную программу решения возникших проблем. Разработанная Концепция переработки мусорных островов в океане показала высокий уровень полимерного и химического образования на уровне экспертов научного совета и полное доминирование западной повестки у экспертов крупных полимерных компаний и правительственных учреждений. Главными причинами возникших противоречий является низкий уровень химического и полимерного образования, который находится в явном несоответствии с полимерной природой основ функционирования планетарного круговорота материи, являющегося основой жизни на нашей планете.

Беглое знакомство со школьной программой по химии показало, что как правило первое упоминание термина полимеры происходит в 9-м классе (О.С.Габриелян «Химия»), что разумеется, поздно. Объяснять детям полимерную природу как важнейшего элемента окружающего мира нужно начиная с уроков природоведения в начальной школе на доступных примерах. Именно тогда надо делать первую прививку от хемо и полимерофобии.

Не лучше обстоят дела и в высшей школе, реально полимеры изучаются только на специализированных кафедрах химических факультетов, с упором на синтетические полимеры. В то время как понятия о полимерах как основном инструменте регулирования углеродного цикла Земли, вокруг которого сейчас ломается столько копий, в программах в явном виде не присутствует. Между тем, видимо, что-то в виде общеобразовательного курса — химические и полимерные основы жизни на планете Земля необходимо создавать в срочном порядке.

#### Фотодинамическая Терапия: Достижения, Догмы, Противоречия и Перспективы

#### $\Theta$ . $\Gamma$ . $\Gamma$ орбунова $^{1,2,3*}$

<sup>1</sup>Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН 
<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова 
<sup>3</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН 
\*e-mail: yulia@igic.ras.ru

Фотодинамическая терапия онкологических заболеваний и бактериальных инфекций (ФДТ) является одним из высокотехнологических методов медицинской помощи, включенных в программу государственных гарантий бесплатного оказания гражданам медицинской помощи в РФ. В основе метода лежит использование фотосенсибилизаторов, способных к селективному накоплению в опухолях с последующей генерацией активных форм кислорода под действием света (Рис. 1). Среди сенсибилизаторов особое внимание привлекают тетрапиррольные макроциклы природного и синтетического происхождения. 1



В данном докладе будут рассмотрены исторические аспекты развития метода  $\Phi Д T$ , текущее состояние химических аспектов применения методов и подходы к разработке фотосенсибилизаторов нового поколения, в том числе наноструктурированных ансамблей и гибридных материалов. <sup>2-9</sup> Такие ансамбли успешно могут применяться для тераностики и применения  $\Phi Д T$  в том числе в условии гипоксии клеток. <sup>10</sup>

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 24-13-00479).

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Koifman O.I. et al. Macroheterocycles 2022, 15 (4), 207.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Bunin D.A. et al. *Dyes and Pigments*, 2022, **207**, 110768.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Kolesnikov I.E. et al. Sensors and Actuat. A: Phys., 2022, 347, 113917.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Bunin D.A. et al., *Biophys. Rev.*, 2023, **15**, 983–998.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Batishchev O.V. et al. Front. Molec. Bioscien., 2023, 10, 1192794.

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Safonova E.A. et al. *Molecules*, 2023, **28**, 1094.

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup> Safonova E.A. et al. *Dyes and Pigments*, 2024, **225**, 112095.

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup> Bunin D.A. et al., *J. Med. Chem.*, 2025, **68**, 658.

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup> Safonova E.A. et al. *Dalton Trans.*, 2025, doi:10.1039/d5dt00808e.

<sup>&</sup>lt;sup>10</sup> Liu H. et al. *Nat. Comm.*, 2025, **16**, 326.

#### Функциональные Полимерные Материалы: Получение, Свойства и Применение

<u>Е.Ю. Крамаренко</u> $^{l,2*}$ , Е.А. Оленич $^l$ , В.В. Городов $^l$ , С.А. Костров $^l$ , К.К. Баканов $^l$ , В.Г. Шевченко $^l$ , Т.А. Наджарьян $^{l,2}$ 

<sup>1</sup>Институт синтетических полимерных материалов РАН им. Н.С. Ениколопова <sup>2</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет

\*e-mail: kram@polly.phys.msu.ru

В настоящее время большое внимание уделяется разработке новых функциональных полимерных композитов, свойствами которых можно эффективно управлять посредством различных внешних стимулов, таких как магнитные и электрические поля, свет, давление и др. Данные материалы чрезвычайно перспективны для различных применений, в частности, для создания на их основе мягких роботов, обладающих целым рядом преимуществ по сравнению с традиционными жесткими, в частности, в адаптации к сложной среде, выполнении автономных задач и имитации движений и функций биологических систем. Особый интерес вызывают материалы, пригодные для 3д-печати, с помощью которой можно создавать сложные детали. Кроме того, внимание уделяется полимерным материалам, поддающимся переработке. В данном докладе будут сформулированы основные принципы получения перерабатываемых функциональных полимерных композитов для 3д-печати, создания магнито- и электроактивных полимерных материалов на основе полиуретановых и полиуретан-силоксановых матриц, возможности придания им свойств фоточувствительности и самозалечивания. Представлены теоретические модели, позволяющие описать механические свойства полимерных матриц, наполненных магнитными микрочастицами, а также методы управления движением мягких роботов на основе магнитоактивных полимерных композитов посредством конфигурирования распределения магнитных частиц в полимерной матрице и внешнего магнитного поля. Будет продемонстрировано, что не только объемные, но и поверхностные свойства магнитоактивных материалов, в частности, шероховатость и краевой угол смачивания водой могут изменяться под действием внешнего магнитного поля. На основе представленных данных будут сформулированы дальнейшие перспективные пути развития данного направления.

Данная работы выполнена при поддержке РНФ (проект № 23-43-00057).

#### Функциональные Материалы для Жидкостных Биосенсоров на Основе Органических Электролитических Транзисторов

<u>Е.В. Агина</u> $^{l*}$ , Е.Ю. Пойманова $^{l}$ , П.А. Шапошник $^{l}$ , С.А. Пономаренко $^{l}$ , Е.Г. Завьялова $^{l}$  <sup>1</sup>Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С Ениколопова РАН \*e-mail: agina@ispm.ru

В последние годы активно развивается область многоцелевого биологического и химического анализа с параллельным обнаружением одного или нескольких аналитов при помощи органических электролитических транзисторов (ОЭТ). В представленном докладе будут обобщены результаты работ по использованию ОЭТ с активным слоем из органических полупроводниковых материалов и различными вариантами узнающих слоев в качестве платформы для многоцелевого биосенсинга (Рисунок 1).

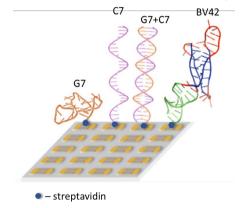


Рисунок 1 - Архитектура мультисенсорной системы на основе ОЭТ с биоузнающими слоями из различных аптамеров (G7, C7, BV42).

В докладе детально рассмотрены принципы работы ОЭТ, их достоинства и недостатки, приведены критерии выбора полупроводниковых и рецепторных материалов для создания жидкостных биосенсоров, причины деградации таких систем и способы их устранения,<sup>2</sup> рассмотрены подходы к созданию многоразовых биосенсоров<sup>3</sup> и устройств для многоцелевого детектирования на одном чипе. Продемонстрированы наиболее успешные примеры мультисенсорных устройств на основе ОЭТ для детектирования биологических и химических маркеров и аналитов. 4

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки (тема FFSM-2025-0001).

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> F.Torricelli, et al. Nat. Rev. Methods Primers, 2021, **66**, 1.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> P.A.Shaposhnik, et al. Russ. Chem. Rev., 2020, **89** (12) 1483 - 1506.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> E.Yu.Poimanova et al. J. Mater. Chem. B, 2025, 13, 4681 - 4692

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> B.S.Kuleshov, et al. Russ. Chem. Rev., 2024, 93 (4) RCR5116.

#### Аптасенсоры: Тест-Системы, Устройства и Подходы для Усиления Сигнала Сенсоров

 $E.\Gamma.$  Завьялова $^{1,2,*}$ 

<sup>1</sup>Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет;

<sup>2</sup>Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН \*e-mail: zlenka2006@gmail.com

Аптамеры — узнающие элементы на основе фрагментов нуклеиновых кислот, которые образуют уникальную пространственную структуру и специфически связывают аналиты. Константы диссоциации комплексов аптамер-белок сопоставимы с константами комплексов антитело-антиген. Аптамеры можно разработать к токсичным и неиммуногенным аналитам, а синтез аптамеров проводят с помощью автоматического синтезатора с возможностью сайт-специфической модификации последовательностей. Эти обстоятельства делают аптамеры на основе нуклеиновых кислот привлекательными узнающими элементами, которые могут быть применены для создания биосенсоров.

Аптамеры совместимы с разнообразными аналитическими методами. Наиболее популярно их использование в сочетании с оптическими и электрохимическими методами детекции. Причем наибольший потенциал имеют портативные устройства с дистанционной передачей сигнала, поскольку такой вариант позволяет вывести сенсоры из лабораторий в реальный мир. В литературных источниках описаны устройства в формате имплантируемых датчиков и датчиков, распечатанных на гибких поверхностях, например, одежде.

Для достижения низких пределов обнаружения используются приемы по усилению сигнала от аналита. Можно выделить несколько результативных подходов. Во-первых, использование «тагов» или «меток» - соединений, сигнал от которых многократно интенсивнее сигнала от аналита. Дизайн сенсоров делают таким образом, чтобы аналит конкурировал с меткой за связывание с аптамером (конкурентный анализ) или наоборот, способствовал связыванию за счет образования тройного комплекса. Вовторых, интересны методы амплификации сигнала за счет образования/разрушения двойных спиралей ДНК. В качестве примеров выделим методы на основе Crispr-Cas систем, изотермическое циклическое замещение цепи и др.

Приведенные подходы позволяют проводить определение аналитов высокоспецифично в сложных биологических смесях с ультра-низкими пределами обнаружения.

Данная работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 23-73-00103).

#### Актуальность и Перспективы Биосенсоров в Травматологии-Ортопедии

 $A.\Gamma.$  Назаренко<sup>l</sup>, T.T. Худалов $^{l}$ , A.A. Кулешов $^{l}$ ,  $\Gamma.H.$  Таиров $^{l}$ , E.B. Агина $^{2,4}$ , E.HO. Пойманова $^{2}$ , A.C. Ерофеев $^{3}$ 

<sup>1</sup>НМИЦ ТО им. Н.Н. Приорова

<sup>2</sup>Институт синтетических полимерных материалов РАН

<sup>3</sup>Университет науки и технологий МИСИС, Научно-исследовательская лаборатория биофизики

<sup>4</sup>Московский государственный университет, факультет фундаментальной физикохимической инженерии

Глубокие инфекции хирургической раны и нарушения сращения являются основными по частоте встречаемости и тяжести последствий осложнениями в оперативной травматологии и ортопедии, чаще всего приводящими к повторным хирургическим вмешательства. Ранняя диагностика на доклинических стадиях может помочь в сохранении импланта, улучшении клинических исходов и снижению материальных затрат на восстановление здоровья. Имплантируемые биосенсоры могут быть источником информации непосредственно из зоны операции. Основные требования к имплантируемым биосенсорам: чувствительность, специфичность, биосовместимость, стабильность работы, малое энергопотребление и небольшие размеры, чтобы не снижать прочностные качества импланта. В диагностике периимплантной инфекции еще более востребованными выглядят мультисенсоры, поскольку диагноз, установленный на основании нескольких малых признаков выглядит более обоснованным нежели на основании одного. Перспективными в диагностике периимплантной инфекции представляются следующие типы биосенсоров: Датчики D-лактата. В организме человека лактат имеет два изомера: L-лактат и Dлактат. Первый в норме присутствует в мышцах и крови; вторая форма в основном продуцируется бактериями, в норме присутствуя лишь в наномолярных концентрациях. Имеются опытные работы, где предложены границы значений, за которыми с высокой степенью вероятности начинается инфекционный процесс.

**Датчики рН**. Нормальный рН живой крови — 7.35–7.45; при асептическом воспалении снижается до 6.5–7.0, при инфекционном воспалении еще ниже.

**Датчики маркеров воспаления** (таких как интерлейкин-6 и фактор некроза опухоли). **Белковые датчики**. Узнающим элементом может быть фермент, аптамер, антитело. Основные достоинства: биосовместимость, высокая специфичность, широкий спектр определяемых маркеров и сверхвысокая чувствительность. Основные недостатки: не всегда высокая стабильность и необходимость использования флуоресцентных меток, что препятствует их расположению внутри живого организма. Возможным выходом могут служить электрохимические датчики, содержащие аптамеры в качестве узнающих элементов.

Для диагностики нарушения сращения и нестабильности имплантов перспективными являются тензометры, акселерометры. Тензометры позволяют мониторировать динамику нагрузок на имплант и оценить течение сращения (снижение — сращение происходит, плато — не происходит). Подобные датчики уже успешно использовались в клинических сериях на людях. Акселерометры позволяют оценить стабильность импланта в/на кости для возможной коррекции послеоперационной реабилитации и назначения остеотропной терапии, а также о необходимости повторного вмешательства. Следует отметить, что работоспособность большей части всех вышеупомянутых биосенсоров продемонстрирована только in vitro, в модельных средах или реальных образцах биологических жидкостей, поэтому поле для дальнейших исследований остается весьма широким.

#### Органические Сопряженные Молекулы Донорно-Акцепторного Типа для Биоэлектроники и Фототерапии

#### $\Theta$ .H. Лупоносов $^{I*}$

<sup>1</sup>Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской академии наук

\*e-mail: luponosov@ispm.ru

Органические сопряженные материалы, благодаря близкому элементному солержанию клеточному составу человека ΜΟΓΥΤ обладать биосовместимостью. Широкие возможности органической химии позволяют не только настраивать комплекс их физико-химических свойств. функциональность, липофильность, получать водорастворимые соединения или соединения, способные образовывать стабильные дисперсии наночастиц в клеточной среде. Вместе со способностью сопряжённых молекул поглощать и излучать свет, выступать в качестве сенсибилизаторов молекулярного кислорода, а также проводить заряды, это открывает широкие возможности их использования в целом ряде применений в биологии и медицине. 1,2 Среди различных классов органических сопряженных соединений особый интерес представляют соединения донорноакцепторного типа, поскольку они обладают настраиваемой и, как правило, довольно узкой оптической щелью. Последнее позволяет получать соединения с поглощением и излучением света в красном и ближнем инфракрасном спектральных диапазонах, т.е. биологически полупрозрачных спектральных диапазонах. Такие материалы и подход активно исследуются для диагностики и терапии различных заболеваний. Органические полупроводники, благодаря настройки их спектральных откликов также могут быть использованы как искусственные фоторецепторы сетчатки глаза человека.<sup>2-5</sup> Возможность печати тонких слоев органических полупроводниковых материалов, в том числе на гибких подложках, позволяет создавать сложные полноцветные протезы сетчатки глаза человека. В докладе будет представлен обзор работ и современных подходов, а также экспериментальных результатов полученных в ИСПМ РАН, направленных на разработку функциональных материалов на основе донорно-акцепторных органических соединений для фототерапии и биоэлектроники.

Работа поддержана Российским научным фондом (номер гранта 19-73-30028).

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> L. Lia, Y. Chen et al., Chinese Chemical Letters, 2019, 30, 1689

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Maya-Vetencourt, J.F., Manfredi, G. et al., Nat. Nanotechnol., 2020, **15**, 698.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> M. Skhunov, A.N. Solodukhin et al., J. Mater. Chem. C, 2021, **9**, 5858

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> A.L. Mannanov, D.O. Balakirev et al. *Molecules*, 2023, **28**(1), 368

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Yu.N. Luponosov, A.N. Solodukhin et al., ACS Biomater. Sci. Eng. 2024, **10**(2), 1139–1152

#### Сенсибилизированные 2D Платформы для Регистрации Раман-Неактивных Соелинений

А.И. Звягина $^{l}$ , <u>М.А. Калинина</u> $^{l*}$ 

<sup>1</sup> Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН \*e-mail: kalinina@phyche.ac.ru

Спектроскопия усиленного поверхностью гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) представляет собой один из наиболее эффективных методов анализа следовых количеств различных веществ с уникально высокой специфичностью распознавания. В то же время, широкий круг молекулярных аналитов выпадает из ряда определяемых этим методом в силу его требований к поляризуемости молекул, взаимодействующих со световым пучком.

Решением этой проблемы может быть использование ГКР-платформ, инициирующих окисление анализируемого вещества с последующей регистрацией спектра окисленной формы. Такие платформы могут быть получены путем интеграции сенсибилизаторов (металлокомплексов макрошиклических порфиринов фталоцианинов), обеспечивающих генерацию синглетного кислорода под действием видимого света, с монослоями оксида графена как прозрачными и прочными наноадгезивами и плазмонными наночастицами – усилителями КР сигнала. Слоистая наноструктура предотвращает контактное тушение фотосенсибилизатора поддерживает непрерывную генерацию синглетного кислорода.

Технически простой метод сборки потенциально применим к широкому кругу макроциклических сенсибилизаторов для отбора наиболее подходящих молекулярных структур с целью создания более доступных и эффективных наносенсоров, активируемых видимым светом. Главное преимущество таких систем — возможность прямого одноэлектронного окисления КР-неактивных соединений без добавления других окислителей. Подобные наносенсоры могут стать основой для скрининговых платформ быстрого тестирования соединений, включая опасные пищевые контаминанты, маркеры социально значимых заболеваний и трудноопределяемые токсичные загрязнители с низким КР сигналом.

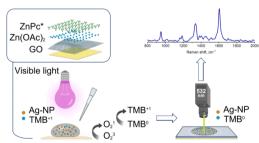


Рис. 1. a) ACM изображение и профиль поверхности монослоя вОГ-AuHЧ, б) КРспектры родамина 6Ж на поверхности различных подложек.

Работа выполнена при поддержке  $PH\Phi$  (проект № 23-73-00095).

.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Zvyagina A.I., Shiryaeva O.A., Afonyushkina E. Yu., et al, *Small Methods*, 2024, **9** (4), 2401420.

#### Методы Искусственного Интеллекта в Дизайне Биополимеров

A.К. Шайтан $^{l*}$ , E.A. Богданова $^{l}$ 

<sup>1</sup>Московский Государственный Университет, Биологический факультет, кафедра Биоинженерии

\*e-mail: shavtan ak@mail.bio.msu.ru

В последние годы методы искусственного интеллекта кардинально трансформируют подходы к дизайну биополимеров, открывая новые возможности в предсказании их структуры, функций и взаимодействий. Если традиционные методы проектирования белков, нуклеиновых кислот и их комплексов опирались на трудоемкие экспериментальные исследования и ограниченные вычислительные возможности, то сегодня глубокое обучение позволяет не только предсказывать структуры с атомарной точностью, но и целенаправленно конструировать биополимеры с заданными свойствами.

Особое внимание стоит уделить разработке и применению алгоритмов глубокого обучения, таких как AlphaFold 2, за создание которого была присуждена Нобелевская премия по химии в 2024 году. Эта технология позволила достичь беспрецедентной точности в предсказании трехмерных структур белков, что имеет фундаментальное значение для молекулярной биологии и фармакологии.

Дальнейшее развитие инструментов, включая AlphaFold 3, расширило возможности моделирования не только отдельных белков, но и их комплексов с нуклеиновыми кислотами и малыми молекулами, что критически важно для понимания механизмов заболеваний и разработки новых лекарств. Наряду с этим, такие алгоритмы, как ProteinMPNN, обеспечивают генерацию стабильных белковых последовательностей с заданными свойствами, значительно ускоряя процесс создания новых биополимеров с требуемыми характеристиками. Отдельного внимания заслуживают методы предсказания молекулярных взаимодействий, например, платформа BindCraft позволяет моделировать связывание белков с лигандами и другими биомолекулами, что открывает новые горизонты в дизайне терапевтических средств. Эти методы незаменимы при разработке ингибиторов белков-мишеней, дизайне белковых каркасов для вакцин или создании синтетических биологических систем. Так, комбинация AlphaFold и диффузионных моделей уже сегодня позволяет генерировать пептиды, специфически связывающиеся с таргетными белками, что перспективно для терапии нейродегенеративных заболеваний. Однако широкое внедрение ИИ в биополимерный дизайн требует решения ряда задач, включая молекулярного моделирования обеспечение интеграцию c методами И интерпретируемости результатов.

В докладе будут рассмотрены актуальные разработки в сфере ИИ-моделирования биополимеров и их практическое применение для решения задач биоинженерии и фармакологии. Особое внимание в докладе будет уделено такому перспективному направлению, как вычислительная интерактомика, которая объединяет методы компьютерного моделирования и искусственного интеллекта для анализа сложных сетей межмолекулярных взаимодействий в живых системах. Развитие этой области имеет ключевое значение в разработке персонализированных терапевтических стратегий, включая создание таргетных противоопухолевых препаратов, где применение ИИ-алгоритмов позволит анализировать уникальные паттерны белковых взаимодействий для каждого пациента и подбирать оптимальные варианты лечения.

Данная работы выполнена при поддержке Минобрнауки  $P\Phi$  (проект № 075-15-2024-539).

# Устройство для Регенерации Периферических Нервов на Основе Органических Полупроводников

 $E.A.\ Юсуповская^{I},\ A.\Gamma.\ Марков^{I,3},\ A.B.\ Гречина^{2},\ A.E.\ Умрюхин^{2},\ <u>П.В.\ Телышев</u>^{I,3*}$ 

<sup>1</sup>Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский университет), Институт бионических технологий и инжиниринга

<sup>2</sup>Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский университет), Кафедра нормальной физиологии

<sup>3</sup>Национального исследовательского университета «МИЭТ», Институт биомедицинской техники

\*e-mail: telyshev d v@staff.sechenov.ru

Повреждения периферических нервов — одна из распространенных проблем современной хирургии. В России ежегодно выполняется от 4 до 7 тысяч операций, связанных с этой патологией. Для ускорения регенерации нервной ткани была разработана обеспечивающая оптоэлектронную стимуляцию манжета. использованием Устройство органического полупроводника. активируется беспроводным способом с помощью световых импульсов. Конструкция манжеты включает гибкую полимерную пленку, на которой размещены золотой электрод и полупроводниковый пиксель, генерирующий стимулирующий сигнал при воздействии светового импульса длиной 625 нм.

Полупроводниковый слой состоит из двух органических материалов: фталоцианина  $(H_2Pc)$  и N,N'-диметилперилен-3,4,9,10-тетракарбоксилимида (PTCDI), каждый толщиной 30 нм. Эти материалы были выбраны за высокую эффективность при воздействии световых импульсов в пределах оптического окна биологических тканей. Для активации клеток требуется изменение мембранного потенциала около 50 мВ, в то время как индуцированное фотоЭДС устройства достигает 250 мВ, что позволяет эффективно стимулировать клетки, даже находящиеся далеко от полупроводникового пикселя.

Экспериментальные исследования in vitro на клеточных культурах Neuro2A и mpf показали эффективность устройства. На поверхности полупроводника в культуре Neuro2A плотность клеток увеличилась в 2.61 раза по сравнению с контролем, а на поверхности золотого электрода — в 2.02 раза. В культуре mpf максимальный эффект был зафиксирован на полупроводнике с увеличением плотности клеток в 1.57 раза, на электроде — в 1.23 раза.

Эксперименты in vivo на седалищном нерве крыс Вистар с ежедневной стимуляцией в течение трех месяцев показали сокращение латентности в группе с применением стимуляции, что свидетельствует о более эффективном восстановлении проводимости нервов по сравнению с контрольной группой.

Данные подтверждают, что разработанная манжета ускоряет регенерацию поврежденных периферических нервов, улучшая функциональные показатели и сокращая время восстановления, что делает устройство перспективным для клинического применения.

Данная работы выполнена при поддержке РНФ (проект № 24–15–00496).

Устные доклады

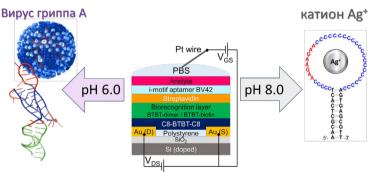
#### Мультипараметрическое Детектирование с Помощью Аптасенсора на Основе Органических Полевых Транзисторов с Электролитическим Затвором

E.Ю. Пойманова $^{1*}$ , Е.А. Кретова $^{1}$ , А.К.Кешек $^{1,2}$ , Е.Г. Завьялова $^{1,2}$ , Е.В. Агина $^{1,3}$ 

 $^{1}$ Институт синтетических полимерных материалов РАН  $^{2}$ Московский государственный университет, Химический факультет  $^{3}$ Московский государственный университет, Факультет фундаментальной физикохимической инженерии

\*e-mail: poymanova@ispm.ru

Потенциальные области применения жидкостных мультисенсоров достаточно широки, однако в настоящее время они не реализуются в достаточной степени из-за высокой стоимости и длительности существующих метолов анализа. Развитие электроники позволяет использовать несколько устройств на одном чипе, используя различные модификации отдельных устройств для целевых и контрольных измерений. Однако решающую роль для прогресса играет архитектура устройства и выбор элементов узнавания. В данной работе в качестве узнающего элемента был использован аптамер BV42 со структурой i-motif, позволяющий полевому органическому полевому транзистору с электролитическим затвором (ОПТЭЗ) обнаруживать аналиты различной природы. Аптамер со структурой i-motif обеспечивает чувствительность ОПТЭЗ к изменению рН среды в биологически значимом диапазоне от 6 до 8. Благодаря рНзависимым свойствам, возникающим при сворачивании и разворачивании аптамера, биосенсор на основе ОПТЭЗ чувствителен к вирусу гриппа А (при рН 6 за счет свернутой конформации аптамера) и ионам серебра (при рН >7.3 за счет развернутой конформации Пример интеграции узнающего аптамера). комбинированными свойствами в ОПТЭЗ с использованием аптамера со структурой іmotif на одном чипе открывает путь к управлению свойствами биосенсора и, в перспективе, мультисенсора. Реализовано доказательство концепции мультисенсора на основе ОПТЭЗ с одним узнающим элементом.



мультипараметрический аптасенсор на основе ОПТЭЗ

Рисунок 1. Дизайн и принцип действия ОПТЭЗ аптасенсора на основе i-motif аптамера для многоцелевого детектирования: определение pH, обнаружение вируса гриппа A при pH 6, катионов серебра при pH 8.

Данная работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 23-73-00103).

#### Механизм Работы Сенсорных Устройств на Основе Органических Полевых Транзисторов

 $A.A.\ Tруль^{I*}, B.П.\ Гайдаржи^I, A.A.\ Абрамов^I, Д.С.\ Анисимов^I, Н.О.\ Дубинец^I, А.Ю.\ Сосорев^I, С.Х.\ Тоиров^I, М.С.\ Полинская^I, О.В.\ Борщев^I, М.С.\ Скоротецкий^I, Е.В.\ Агина^I, С.А.\ Пономаренко^{I,2}$ 

<sup>1</sup>Институт Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова РАН \*e- mail: trul@ispm.ru

Органические полевые транзисторы (ОПТ) обладают высокой чувствительностью к составу окружающей среды за счет прямого взаимодействия между тонким проводящим слоем ОПТ и анализируемым веществом. Несмотря на большое количество работ в области все еще нет понимая общего механизма работы таких сенсорных устройств. Все сходятся, что молекулы аналита сорбируются на поверхность полупроводника и за счет взаимодействия с ним изменяют электрические характеристики ОПТ. Однако полного понимания что это за взаимодействие и какие параметры аналита или полупроводника влияют на него на данный момент нет.

В данной работе будут представлены и обсуждены ОПТ на основе различных производных бензотиенобензотиофена. Изучение сенсорных свойств этих устройств позволило предположить, что чувствительность устройств зависит от плотности свободных ловушек носителей заряда и чем больше плотность свободных ловушек, тем выше чувствительность. А также, что чувствительность в основном определяется разницей энергетических уровней полупроводника и аналита, причем чем ближе уровни, тем выше чувствительность. В то же время отмечено, что морфология и упаковка молекул в слое способны также вносить значительные изменения в чувствительность ОПТ (при условии наличия чувствительности согласно близости энергетических уровней).

Данные наблюдения будут подробно представлены в докладе, а также будет представлено дальнейшее развитие данной тематики для обобщения этих выводов на большее количество устройств.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (проект № 19-73-30028 $\Pi$ ).

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> A. A. Trul et al., *J Mater Chem C*, 2018, **6**, 9649-9659.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Wei Huang., et al., Organic Electronics - 2013 V. 13 P. 3453-3459.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Kumar A. et al. Chemical Physics Letters. – 2018. – V. 698. – P. 7-10.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> D.S. Anisimov, A.A. Trul, et al. Sensors and Actuators B-Chemical (submitted).

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> A.A. Trul, V.P. Gaidarzhi, et. al. Applied Materials and Interfaces (under preparation).

#### Рабочая Температура Газового Сенсора в Качестве Входного Параметра Нейросетевых Алгоритмов для Определения Сверхмалых Концентраций

M.Д. Андреев $^{l}$ , А.А. Гребенкина $^{l,2}$ ,  $\underline{B}$ . $\underline{B}$ . Кривецкий $^{2*}$ 

<sup>1</sup>Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет

<sup>2</sup> НПК «Технологический центр»

\*e-mail: vkrivetsky@inorg.chem.msu.ru

Детектирование сероводорода в атмосферном воздухе представляет собой актуальную задачу непрерывного экологического мониторинга. Сложность данной задачи обусловлена весьма низкой предельной допустимой концентрацией (ПЛК) H<sub>2</sub>S в атмосфере -6 млрд $^{-1}$  (0.008мг/м $^{3}$ ). Использование полупроводниковых газовых сенсоров в сочетании с нейросетевыми подходами к построению модели сенсорного отклика открывает возможность для решения подобных задач. В работе использовалось четыре сенсора на основе нанокристаллического диоксида олова, модифицированного каталитическими компонентами – наночастицами золота, платины и палладия. Сенсоры были изготовлены на базе кремниевых МЭМС-структур с малой тепловой инерцией и эксплуатировались в режиме модуляции рабочей температуры. В рамках работы при построении нейросетевой модели отклика сравнивались два подхода - один с применением только сопротивления чувствительного элемента в качестве входного параметра, зависящего от концентрации сероводорода и второй, использовавший в качестве входного параметра рабочую температуру сенсора, оказывающую определяющее влияние на сопротивление чувствительного элемента детектировании сверхнизких концентраций газов.

В первом приближении зависимость электрического сопротивления полупроводника от температуры можно описать уравнением ln(R) = ln(R(0)) - A'/T, которое при переходе к десятичному логарифму можно переписать в виде lg(R) = B + A/T. Таким образом задача нейросетевой модели сводится к подбору коэффициентов A и B зависимости от температуры при заданной концентрации сероводорода, что позволяет в дальнейшем решить обратную задачу:  $lg[H_2S] = lg(R) + B + A/T$ .

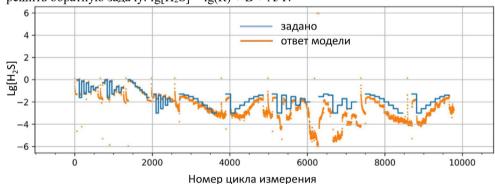


Рис. 1. Зависимость заданной концентрации сероводорода в воздухе и соответствующего ответа модели от номера измерительного цикла.

Согласно Рис. 1 построенная нейросетевая модель на базе архитектуры четрыехслойного персептрона работоспособна в условиях низких детектируемых концентраций в диапазоне  $1-0,001~{\rm mm}^{-1}$ .

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда N 22-19-00703- $\Pi$ , <u>https://rscf.ru/project/22-19-00703/</u>.

# Электронный Нос на Основе Полупроводниковых Сенсоров для Классификации Широкого Спектра Газовых и Жидкостных Смесей

A.A. Абрамов $^{l*}$ , Е.В. Агина $^{l}$ 

<sup>1</sup>Институт синтетических полимерных материалов им. Ениколопова РАН \*e-mail: abramov@ispm.ru

Электронный нос — это устройство, которое способно обнаруживать и распознавать запахи и вкусы с помощью массива датчиков. Развитие технологий машинных «органов чувств» способствуют развитию интереса и к машинному обонянию. Подобные устройства востребованы в областях здравоохранения, мониторинга окружающей среды, промышленности, определения качества и хранения продуктов питания.

Ввиду широкого спектра применения таких систем, существует множество оптимальных для той или иной задачи реализаций компонентов системы с точки зрения видов и материалов сенсоров, конструкции устройства, методов обработки данных.

Целью этой работы является разработка технологичных подходов к созданию мультисенсорных систем класса «электронный нос» для газовых и жидкостных применений с использованием полупроводниковых сенсорных элементов.

В процессе разработки такого устройства необходимо: для используемого типа сенсоров определить принцип получения сенсорного сигнала и алгоритм извлечения отклика; разработать устройство, реализующее этот принцип; сконструировать устройство, позволяющее проводить анализ пробы; на основании полученных данных оценить эффективность методов машинного обучения в рамках конкретного применения.

Разработано устройство для одновременного исследования откликов массивов OFET-сенсоров, модифицированных разными рецепторными слоями, с помощью которого продемонстрирована разница в чувствительности модифицированных сенсоров к набору токсичных газов в малых концентрациях, а также разработаны методики извлечения отклика. На основе полученного набора экспериментальных данных откликов сенсоров был произведен поиск и выбор адекватного алгоритма машинного обучения, позволивший перейти к практической задаче определения порчи белковых продуктов. Актуальность задачи анализа выдыхаемого воздуха в медицинской диагностике привела к разработке устройства класса «электронный нос» на основе металлоксидных газовых сенсоров, ввиду их большей стабильности и надежности в атмосфере выдыхаемого воздуха. На основании экспериментальных данных по выдохам людей предложены различные методы извлечения отклика и компенсации дрейфа.

На основании экспериментальных данных выборки здоровых людей и больных коронавирусом было продемонстрировано влияние способа извлечения отклика и метода классификации на качество бинарной классификации. Аналогичное исследование было проведено для туберкулёза.<sup>3</sup>

Расширением подхода для газового анализа являются исследования систем с использованием сенсоров на основе транзисторов с электролитным затвором. Этот тип сенсоров позволяет перейти к спектру задач, связанных с анализом жидких сред. Аналогично предыдущим решениям были разработаны устройство для подачи пробы и специализированный измеритель. На данном этапе была продемонстрирована принципиальная работоспособность системы. 4

Данная работы выполнена в рамках госзадания FFSM-2025-0001.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Anisimov D. S. et al. Sci Rep. – 2021. – V. 11, № 1. – P. 10683.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Anisimov D. S. et al. ACS Omega 2023, 8, 5, 4649–4654

<sup>3</sup> Е.Ю. Пойманова. Лабораторная служба, 2024, Т. 13, №4, с.12–19

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Poimanova E.Y. et al. Chemosensors. – 2023. – V.11, №8. – P. 464

#### Новые Материалы для Органических Полевых Транзисторов на Основе Полисилоксанов с Привитыми ВТВТ-Группами

<u>П.А. Шапошник</u> $^{l*}$ , Е.А. Заборин $^{l}$ , А.А. Труль $^{l}$ , О.В. Борщев $^{l}$ , С.А. Пономаренко $^{l}$ 

<sup>1</sup>Институт синтетически полимерных материалов РАН \*e-mail: polinashaposhnik@ispm.ru

Органические полупроводниковые материалы на основе бензотиено[3,2b][1]бензотиофена (BTBT) широко применяют для создания различных типов органических полевых транзисторов. Наиболее распространенным материалом на основе ВТВТ является 2,7-диоктил-ВТВТ (С8-ВТВТ), на основе которого ранее были получены материалы с высокой подвижностью носителей заряда. Однако пленки на основе ч ВТВТ характеризуются нестабильностью и переходом из тонкопленочной фазы в объемную, что приводит к существенному изменению морфологии и, следовательно, электрических характеристик. Поэтому в данной работе были разработаны и исследованы материалы, которые представляют собой смеси нового полимера на основе полисилоксана с привитыми BTBT-группами с «малой молекулой» С8-ВТВТ. Были исследованы полимеры с различным содержанием привитых ВТВТгрупп, а также смеси с различными соотношениями полимер: С8-ВТВТ. Показано, что подвижность носителей зарядов ОПТ на основе таких смесей сравнима с подвижностями ОПТ на основе С8-ВТВТ, изготовленных в аналогичных условиях, что говорит о перспективности такого материала. Также было проведено сравнение свойств материалов сразу после изготовления и после месяца хранения. Было показано, что использование смеси C8-BTBT и нового полимера позволяет повысить стабильность морфологии полупроводниковой пленки, что позволяет сохранить полевой эффект устройств. В то же время пленки на основе С8-ВТВТ без добавления полимера за то же время хранения подверглись деветтингу, что привело к потере полевого эффекта в устройствах на их основе.

a) 
$$- \stackrel{\mid}{\text{Si-O}} - \stackrel{\mid}{\stackrel{\mid}{\text{CH}_3}} = \stackrel{\mid}{\text{Si-O}} - \stackrel{\mid}{\text{Si-O}} = \stackrel{\mid}{\text{Si-O}} =$$

Рис. 1. а) Структура новых полисилоксановых полимеров; б) структура С8-ВТВТ.

Данная работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 19-73-30028-П).

#### Коррекция Дрейфа Базовой Линии для Газовых Сенсоров на Основе ОПТ и МОП

<u>Д.А. Красников</u> $^{l,2*}$ , А.А. Труль $^{l}$ , В.П. Гайдаржи $^{l}$ , Е.В. Агина $^{l}$ 

¹ООО «Принтэлтех» ²МГУ им. Ломоносова \*e-mail: danankr@gmail.com

В последние годы системы газового анализа типа «электронный нос», основанные на органических полевых транзисторах (ОПТ) и массивах металлоксидных полупроводниковых (МОП) сенсоров, находят широкое применение для анализа газовых смесей в задачах мониторинга окружающей среды и медицинской диагностики. Одной из важных проблем, ограничивающих точность количественного анализа, остаётся дрейф базовой линии — медленное смещение сигнала, вызванное влиянием внешних факторов, процессами восстановления или деградацией материалов сенсора. Для устранения данной проблемы в работе рассматривается программный метод коррекции дрейфа на основе асимметрично взвешенных штрафных наименьших квадратов (arPLS). 4

Исследование включает обработку данных, полученных с ОПТ-сенсоров при тестовых циклах подачи различных концентраций токсичных газов, а также с массива МОП-сенсоров, использованных для анализа выдыхаемого воздуха пациентов с подтверждённым диагнозом туберкулёза. Алгоритм arPLS реализует итеративную коррекцию базовой линии (Рис. 1), что позволяет повысить воспроизводимость и качество извлекаемых признаков при анализе сигналов. Особое внимание уделяется исследованию влияния параметра сглаживания  $\lambda$  на результаты обработки и устойчивость коррекции при различных типах сенсорных данных.

В работе обсуждаются особенности применения метода arPLS для разных классов сенсорных устройств, его ограничений и перспектив в задачах автоматизированного анализа данных. Полученные результаты могут быть полезны для дальнейшего развития программных подходов к обработке сигналов в сенсорных системах.

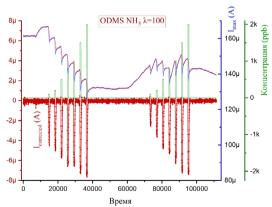


Рис. 1. Сравнение исходного и скорректированного сигнала сенсора после применения arPLS,  $\lambda = 100$ 

26

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Zhang C., Chen P., Hu W. Chem. Soc. Rev., 44, 8 (2015), 2087–2107.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Al-Difaie Z., Brandts L., Peeters A., et al. JAMA Netw Open, 5, 6 (2022).

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Lee J. B., Heeney M., Tierney S., et al. MRS Proceedings, **871** (2011).

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Baek S. J., Park A., Ahn Y. J., Choo J. Analyst, **140**, 1 (2015), 250–257.

#### Разработка Подхода к Калибровке Сенсоров с Металло-Оксидной Пленкой (МОП-Сенсоров) для Использования их в Диагностике Заболеваний по Составу Выдыхаемого Воздуха

 $\underline{C.A.\ Meльников}^{I*}$ , Е.Ю. Пойманова $^{I}$ , В.Д. Пойманов $^{I}$ , Е.В. Агина $^{I}$ 

<sup>1</sup>OOO «Технологии печатной электроники» \*e-mail: stasmelnikov2006@gmail.com

Устройства класса «Электронный нос», состоящие из массивов металло-оксидных сенсоров, широко используются для диагностики различных заболеваний по составу выдыхаемого воздуха $^1$ .

Основная проблема металло-оксидных сенсоров — краткосрочный и долгосрочный дрейф базовой линии и их параметров сенсорной чувствительности, связанный с некоторыми физическими особенностями сенсоров. Краткосрочный дрейф, в частности, может быть вызван изменением текущих физических параметров окружающей среды: температуры и влажности. Долгосрочный дрейф возникает в связи с неполной десорбцией аналита с поверхности сенсора, а также из-за постепенной деградации метал-оксидного слоя, связанной с долгим пребыванием при высоких температурах. Помимо долгосрочного дрейфа в результате деградации сенсоров снижается их чувствительность, то есть при воздействии аналита одной природы, концентрации и при схожих параметрах среды величина отклика сенсора уменьшается. Кроме того, ни один из металло-оксидных сенсоров изначально не рассчитан на анализ летучих органических соединений, присутствующих в выдыхаемом воздухе, поэтому использование стандартных калибровок, описанных производителем, представляется маловозможным.

Таким образом, важной задачей является разработка подхода к калибровке массива МОП-сенсоров для их использования в составе электронного носа для экспрессдиагностики по составу выдыхаемого воздуха. В данной работе мы исследовали возможность калибровки МОП-сенсоров по ряду низкомолекулярных газов, таких как СО, NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>S, NO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>, а также по водным растворам этанола разных концентраций. Были исследованы корреляции между откликами сенсоров на калибровочные составы и сенсорные отклики на выдыхаемый воздух у здоровых людей. Установлено, что наиболее эффективной является калибровка по этанолу. Удалось разработать простую и быструю процедуру калибровки МОП-сенсоров, позволяющую осуществлять ее в автоматизированном режиме, в том числе в условиях медицинского учреждения.

\_

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> van der Sar, I.G., Wijbenga, N., Nakshbandi, G. et al. Respir Res, 2021, 22, 246.

#### Перспективы Применения Биосенсоров в Хирургии Позвоночника

 $A.\Gamma$ . Назаренко<sup>l</sup>, A.A. Кулешов<sup>l</sup>, T.T. Худалов<sup>l</sup>,  $\Gamma$ .Н. Таиров<sup>l\*</sup>

<sup>1</sup>Федеральное Государственное Бюджетное Учреждение "Национальный медицинский исследовательский центр травматологии и ортопедии имени Н.Н. Приорова" Министерства здравоохранения Российской Федерации

\*e-mail: gazinur.vezunchik@mail.ru

Цель – продемонстрировать актуальность и перспективы разработки «умных» имплантов в спинальной хирургии.

#### Актуальность работы

В связи с развитием технологий и увеличением продолжительности жизни возрастает количество оперативных вмешательств на позвоночнике. Основная цель оперативного лечения при большинстве хирургических вмешательств – стабилизация, коррекция деформации и декомпрессия невральных структур.

Глобальный рынок спинальных имплантатов оценивался в \$12.3 млрд в 2022 году и достигнет \$23.7 млрд к 2032. Рынок оборудования для лечения заболеваний позвоночника составил \$44.55 млрд в 2024 году (рост на 4% по сравнению с 2023 годом). В связи с ростом количества операции растёт и количество осложнений. Самыми распространёнными осложнениями являются нестабильность металлоконструкции (3—15%) и инфекционные осложнения (1-5%).

Борьба с осложнениями требует значительных ресурсов как технических, так и экономических, что может приводить не только к ухудшению качества жизни пациентов, но и к их инвалидизации.

Внедрение биосенсоров в спинальные импланты может существенно изменить статистику осложнений и может быть использовано для: прогнозирования нестабильности с целью персонализации ортопедического режима, раннего выполнения ревизионных вмешательств, а также ранней антибактериальной терапии с целью предотвращения образования биоплёнок при развитии инфекционных осложнений.

На данный момент применение биосенсоров в хирургии позвоночника представлено лишь экспериментальными моделями, чаще всего с использованием тензодатчиков и практически не имеет клинического применения.

#### Заключение

Развитие технологий и внедрение умных имплантов может существенно улучшить результаты спинальной хирургии. Успех реализации и развития данного направления будет зависеть от междисциплинарной работы команды, в которую должны входить: травматологи-ортопеды, инженеры, биотехнологи, материаловеды, специалисты по искусственному интеллекту и нанотехнологиям, специалисты по кибербезопасности, химики, физики, микробиологи и др.

Данная работа выполнена при поддержке РНФ

# Создание Биорецепторного Слоя с Помощью Методов «Клик»-Химии на Поверхности Органических Полевых Транзисторов с Электролитическим Затвором

E.A. Кретова $^{l*}$ , Е.Ю. Пойманова $^{l}$ , М.С. Скоротецкий $^{l}$ , Е.Г. Завьялова $^{l,2}$ , С.А. Пономаренко $^{l,2}$ , Е.В. Агина $^{l,3}$ 

<sup>1</sup>Институт синтетических полимерных материалов РАН им. Н.С. Ениколопова <sup>2</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Химический факультет

<sup>3</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Факультет фундаментальной физико-химической инженерии

\*e-mail: e.kretova@ispm.ru

Разработка биорецепторных слоев с заданной морфологией и функциональностью на поверхности органических полевых транзисторов с электролитическим затвором (ОПТЭЗ) — ключевая задача при создании жидкостных биосенсоров. Использование ОПТЭЗ в качестве биосенсоров имеет ряд преимуществ, основным из которых можно выделить их способность работать при напряжении менее 1В. Такая особенность позволяет использовать устройства при работе с биологическими жидкостями разной природы. При этом исключается возможность протекания побочных реакций, связанных с электролизом воды, что повышает точность и достоверность биосенсорных измерений. В данной работе продемонстрирован принцип создания биорецепторного основанного на введении алкин-содержащей компоненты полупроводникового слоя и дальнейшего «прикликивания» биотина на поверхность ОПТЭЗ благодаря протеканию реакции азид-алкинового цикроприсоединения.

Изготовленные ОПТЭЗ представляют собой трехэлектродную систему, состоящую из нижних золотых контактов стока и истока и верхнего затвора -платиновой проволоки, погруженной в электролит, а также слоя органического полупроводника. Полупроводниковый слой состоял из 2,7-диоктил[1]бензотиено[3,2-b][1]бензотиофена (С8-ВТВТ-С8), полистирола и специально синтезированной добавки, содержащей алкиновую группу (С11-ВТВТ-С6-0-С3) в концентрациях 0, 1, 10 и 20 мас.% от содержания С8-ВТВТ-С8 для возможности дальнейшего проведения реакции азидалкинового взаимодействия на поверхности ОПТЭЗ. Затем благодаря проведению «клик»-реакции на поверхности, а именно участию алкиновых функциональных групп в слое полупроводника в реакции азид-алкинового циклоприсоединения, был сформирован рецепторный слой для дальнейшего обнаружения вируса гриппа А. Морфология формирующихся поверхностей ОПТЭЗ была исследована методами поляризационной оптической и атомно-силовой микроскопии, а также измерением контактного угла смачивания. Определено влияние содержания алкиновой компоненты в составе органического полупроводника и показано, что оптимальной является концентрация 10 мас.%. Последующая модификация биотиновых фрагментов стрептавидином и ДНК-аптамером в качестве узнающего элемента позволила создать биосенсор, обнаруживающий вирус гриппа A в концентрации 3×10<sup>6</sup> вир.частиц/мл, что соответствует чувствительности тест-полосок на основе антител.

Преимущество предложенного метода биофункционализации поверхности ОПТЭЗ заключается в том, что было достигнуто уменьшение расстояния между токонесущим слоем и аналитом, что открывает потенциал к увеличению чувствительности устройства наряду с упрощением технологии изготовления ОПТЭЗ.

Данная работы выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 23-73-00103).

#### Конформационные Переходы і-мотива как Основа для Биосенсора к Нескольким Аналитам

А.К. Кешек $^{1,2*}$ , Е.Г. Завьялова $^{1,2}$ 

<sup>1</sup>Московский Государственный Университет, Химический факультет <sup>2</sup>Институт синтетических полимерных материалов РАН \*e-mail: akeshek@list.ru

i-Мотив — это неканоническая регуляторная структура ДНК, которая формируется рНзависимо в богатых цитозином областях и участвует в управлении активностью генов, особенно в промоторах. Его формирование влияет на транскрипцию и структурную организацию ДНК, а также служит чувствительным переключателем, реагирующим на изменения внутриклеточной среды, а именно рН, концентрация i-мотив связывающих белков и др.

Олигонуклеотидные последовательности, способные образовывать структуру і-мотива могут быть использованы в качестве распознающего элемента для создания биосенсора к нескольким аналитам. В качестве модельной системы был использован аптамер BV42, і-мотива. фланкированного обладающий структурой дуплексными последовательностями. Кинетику фолдинга И денатурации і-мотива, модифицированного флуоресцентной меткой, при различных значениях рН изучали методом кинетики остановленного потока (stopped-flow). термодинамических параметров связывания ионов серебра с і-мотивом была применена изотермическая титрационная калориметрия (ITC).

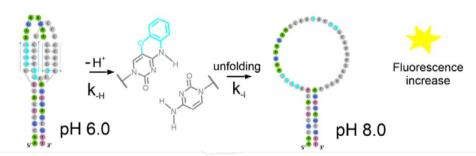


Рис. 1. Схематическое представление изменения структуры BV42 при разном рН

Полученные результаты показали, что дуплекс стабилизирует і-мотив, особенно вблизи соединения двух структур. Также было установлено, что кинетика сворачивания и разворачивания і-мотива зависит от рH, причем скорость и механизм различаются в зависимости от позиции флуоресцентной метки. Важно отметить, что соединение і-мотива и дуплекса остается динамичным, что позволяет частичное разворачивание і-мотива для связывания других лигандов, таких как ионы серебра. Кроме того, было показано, что связывание  $Ag^+$  с і-мотивом конкурирует с протонированием цитозиновых оснований, что влияет на стабильность і-мотива. Анализ данных ІТС выявил, что связывание  $Ag^+$  с BV42 носит эндотермический характер и определяется энтропийной составляющей I.

Данная работы выполнена при поддержке РНФ (проект № 23-73-00103).

30

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Alieva R., Keshek A., Zavyalova E., et.al. *Biophys. Chem*, 2025, 316, 107350

#### Применение Краун-Эфиров для Детектирования Ионов Металлов при Помощи Органических Электролитических Транзисторов

<u>Б.С. Кулешов</u> $^{1*}$ , Е.Ю. Пойманова $^{1}$ , Д.А. Скворцов $^{2}$ , С.А. Пономаренко $^{1,3}$ , Е.В. Агина $^{1,2}$ 

<sup>1</sup>Институт синтетических полимерных материалов РАН <sup>2</sup>Московский Государственный Университет, факультет фундаментальной физикохимической инженерии

<sup>3</sup>Московский Государственный Университет, химический факультет \*e-mail: b.kuleshov@ispm.ru

Органический полевой транзистор с электролитическим затвором (ОПТЭЗ) — перспективный сенсорный элемент, способный обнаруживать аналиты различной природы в широком диапазоне концентраций. Среди основных преимуществ ОПТЭЗ - работа в области низких напряжений, позволяющая избегать негативных окислительновосстановительных реакций, а также возможность безметочного определения широкого спектра аналитов.

Ранее была показано влияние рН среды аналита на электрические характеристики ОПТЭЗ устройств<sup>2</sup>, однако до конца не изучены механизмы такого влияния. В то же время с 60х годов прошлого века известен класс краун-эфирных соединений (рис. 1), способных селективно связывать ионы самых различных металлов. В данной работе предполагается исследование нового рецепторного слоя на основе краун-эфирных групп для определения ионов различных металлов, а также исследование работы ОПТЭЗ в растворах большой ионной силы.

Для исследования использовались устройства, содержащие 2,7-диоктилбензотиено[3,2-b]бензотиофен в качестве полупроводникового слоя, а также смесь силоксанового димера и краун-производного в качестве рецепторного слоя (рис. 1). Полученные результаты позволят обеспечить лучшее понимание работы ОПТЭЗ в растворах реальных электролитов, а также позволят создать новый тип устройств для экспрессанализа сточных вод на ионы тяжелых металлов при помощи краун-эфирных соединений.

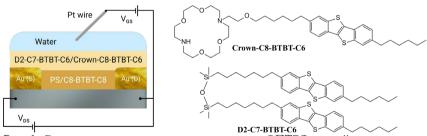


Рис. 1. Слева — схема строения предложенного ОПТЭЗ-устройства, справа — структурные формулы силоксанового димера и краун производного, используемых для создания рецепторного слоя.

Данная работы выполнена при поддержке Минобрнауки России (тема гос. задания FFSM-2025-0001).

<sup>3</sup> Izatt, R. Et al. *Chemical Reviews*, 1985, **85**(4), 271–339.

-

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Torricelli F. et al. Nature Reviews Methods Primers., 2021, 1(1), 66.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Shaposhnik P. A. et al. *Chemosensors.*, 2023, **11** (2), 74.

# Новый Подход к Функционализации Активного Слоя на Основе PEDOT:PSS для Создания Биосенсоров

<u>Я.О. Титова</u> $^{1*}$ , Е.Ю. Пойманова $^{1}$ , А.А. Труль $^{1}$ , А.К. Кешек $^{1,2}$ , Е.В. Агина $^{1,3}$ , С.А. Пономаренко $^{l,2}$ 

<sup>1</sup>Институт синтетических полимерных материалов РАН 
<sup>2</sup>Московский Государственный Университет, Химический факультет 
<sup>3</sup>Московский Государственный Университет, Факультет фундаментальной физикохимической инженерии

\*e-mail: yaroslava.titova@ispm.ru

Ha сеголняшний лень возникает необходимость проведения биологических исследований и клинической диагностики в жидкостных средах для детектирования и определения различных вирусов. Органические электрохимические транзисторы (ОЭХТ) являются идеальной платформой для исследований в области неинвазивного обнаружения В биомедицине<sup>1</sup> благодаря компактным размерам, чувствительности и использованию биосовместимых материалов. Одним из таких материалов комплекс поли(3,4-этилендиокситиофена) является полистиролсульфокислотой (PEDOT:PSS), который наиболее часто используется в органической электронике благодаря наличию как электронной, так и ионной проводимостей $^{2}$ .

Функционализация поверхности ОЭХТ представляет собой актуальную задачу, поэтому в данной работе представлена функционализация поверхности PEDOT:PSS биорецепторным слоем, для создания которого поверхность PEDOT:PSS модифицировали гексильными группами, а в качестве рецепторного слоя использовали ленгмюровский слой на основе силоксанового димера [1]бензотиено[3,2b][1]бензотиофена (D2-Hept-BTBT-Hex – BТВТ-димер)<sup>3</sup> и его биотинилированного производного [1]бензотиено[3,2-b][1]бензотиофена (ВТВТ-биотин)<sup>4</sup>. Специфичность созданного биосенсора продемонстрирована с помощью биотин-стрептавидинового взаимодействия биорецепторной поверхности со стрептавидином, ДНК-аптамером в качестве узнающего элемента, инактивированным вирусом гриппа А в качестве аналита и инактивированными вирусами гриппа Б, болезни Ньюкасла или алантоисной жидкостью в качестве контрольных экспериментов (рис. 1).

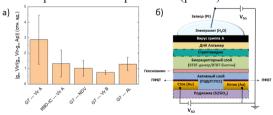


Рис.1. Отклик устройств на основе ОЭХТ с различными поверхностями при специфическом и неспецифическом взаимодействиях (а) и архитектура ОЭХТ устройства (б)

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-73-30028-П).

<sup>2</sup> П.А. Шапошник и др. Успехи химии, 2020, **89(12)**, 1483-1506.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> R. Brendgen et al. *Micro*, 2024, **4(4)**, 530-551.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> A.A. Trul et al. *Adv. El. Mat.* 2022, **8 (5)**, 2101039.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> E. Yu. Poimanova et al. ACS Appl. Mat. Interfaces, 2022, 14 (14), 16462

#### Сенсор на Ртуть на Основе Органического Полевого Транзистора с Электролитическим Затвором и Аптамеров

<u>Д.А. Сквориов</u><sup>2\*</sup>, Е.Ю. Пойманова $^{l}$ , А.К.Кешек $^{l,2}$ , Е.Г. Завьялова $^{l,2}$ , Е.В. Агина $^{l,3}$ 

<sup>1</sup>Институт синтетических полимерных материалов РАН 
<sup>2</sup>Московский государственный университет, Химический факультет 
<sup>3</sup>Московский государственный университет, Факультет фундаментальной физико-химической инженерии

\*e-mail: dmitriiskv141@gmail.com

Катионы ртуги, часто попадающие в окружающую среду параллельно с отходами промышленного производства – высокотоксичные загрязнители, накапливаться в пише и быть причиной локальных вспышек отравлений. Быстрый и простой метод обнаружения ртути – актуальная проблема мониторинга загрязнений сточных вод и т.п. Современной платформой для разработки широкого спектра различных биосенсоров и датчиков на ионы с высокой специфичностью и низким обнаружения являются органические полевые транзисторы электролитическим затвором (ОПТЭЗ). В качестве узнающих элементов в них могут выступать ферменты, антитела, аптамеры. Уникальная структура и химическое разнообразие молекул аптамеров открывает возможность создания самых различных датчиков на один или несколько конкретных аналитов. Целью данной работы стало исследование аптамеров, обладающих высокой аффинностью к катионам Hg<sup>2+</sup>, в рамках разработки мультисенсора на тяжелые металлы на основе ОПТЭЗ.

В качестве платформы ОПТЭЗ использован описанный ранее подход к изготовлению биосенсора с активным полупроводниковым слоем на основе C8-BTBT-C8 в смеси с полистиролом и биорецепторным слоем на основе силоксанового димера ВТВТ и биотин-производного ВТВТ-биотин. Стрептавидиновый слой был функционализирован узнающими элементами аптамерами HgTT и HgTT2 (рис. 1). Результаты исследований показали чувствительность аптасенсоров на основе ОПТЭЗ к катионам  $Hg^{2+}$ , в сравнении с контрольными катионами металлов ( $Cu^{2+}$ ,  $Cd^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Pb^{2+}$  и др.). Аффинность аптамеров к исследуемым катионам металлов продемонстрирована ранее с помощью изотермической калориметрии, спектроскопии кругового дихроизма и УФспектроскопии. Комплексы с ртутью вызывают значительное смещение максимального тока устройств ( $I_{max}$ ) в насыщенном режиме. При этом образование комплекса (HgTT) —  $Hg^{2+}$  не зависит от концентрации солей в растворе.

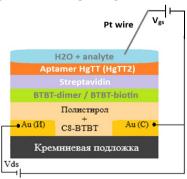


Рисунок 1. Дизайн аптасенсора на ртуть на основе ОПТЭЗ

Данная работы выполнена при поддержке РНФ (проект № 23-73-00103).

#### Электрические и Сенсорные Свойства Производных Тиофен-Фенилена

B.A. Нагорный $^{l*}$ , Д.А. Красников $^{l}$ , А.А. Труль $^{l}$ , Е.В. Агина $^{l}$ 

<sup>1</sup>Институт Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова РАН \*e-mail: v.nagornyi@ispm.ru

Органические полевые транзисторы (ОПТ) проявляют сильную зависимость электрических свойств от состава окружающей среды, что является перспективным использованием их, в качестве газовых сенсоров, для мониторинга состава атмосферы и неинвазивной диагностики заболеваний. 2

На данный момент в литературе не существует единой теории механизма взаимодействия аналитического газа и полупроводника. <sup>3,4</sup>. Недавно на молекулах с полупроводниковым ядром на основе бензотиенобензотиофена (ВТВТ) было предположено, что чувствительность может определяться близостью уровней ВЗМО полупроводника и уровнями ВЗМО или НСМО исследуемого газа. <sup>5</sup>

Для подтверждения общности этого предположения в этой работе были исследованы олигомеры тиофен-фенилена (РТТР) с триметилсилильными концевыми группами (ТМS-РТТР) и без концевых групп (H-РТТР)<sup>6</sup>, ВЗМО которых совпадает как между собой, так и находимся близко ВЗМО ВТВТ.

Все ОПТ были получены методом термического напыления в вакууме и продемонстрировали поведение, типичное для устройств р-типа. Типичные электрические характеристики исследованных материалов, а также референса на основе ВТВТ приведены в Таблице 1.

Таблица -1 Электрические характеристики ОПТ для разных полупроводников

Полупроводник	$\mu \cdot 10^3$ , cm <sup>2</sup> B <sup>-1</sup> c <sup>-1</sup>	V <sub>th</sub> , B	Імакс/Івыкл, нА
TMS-PTTP	$3.28\pm0.18$	-15.9±1.7	$10^{3}$
H-PTTP	10.6±0.1	-12.5±0.4	$10^{4}$
C8-BTBT	140±40	-15.0±3.0	$10^{6}$

Сравнение сенсорных свойств показало, что олигомер с триметилсилильными концевыми группами демонстрирует схожую с референсным ОПТ чувствительность в 80 %/ppm (против 67 %/ppm для референса), в то время как олигомер без концевых групп демонстрирует достаточно низкую чувствительность (~4 %/ppm), что может быть связано с морфологией и/или упаковкой слоя. В ходе доклада сенсорные свойства будут рассмотрены подробнее.

Работа выполнена при поддержке Министерства Науки и Образования РФ (Госзадание № FFSM-2025-0001).

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> M. Taştan, et al. Applied Sciences, 2019, 9, 3435;

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> K. Snitz, et al. PLoS One, 2021, 16, e0252121;

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Wei Huang., et al., Organic Electronics - 2013 V. 13 P. 3453-3459.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Kumar A. et al. Chemical Physics Letters. – 2018. – V. 698. – P. 7-10.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Trul A., et al. Applied Materials and Interfaces (under preparation)

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> A. Sosorev., et al., ACS Appl. Mater. Interfaces 2020, 12, 8, 9507–9519

#### Ультратонкие Покрытия на Основе Оксида Графена и Наночастиц Золота для Спектроскопии Гигантского Комбинационного Рассеяния

<u>А.И. Звягина $^{1*}$ , К.О. Радыгин $^{2}$ , А.А. Аверин $^{1}$ , М.А. Калинина $^{1}$ </u>

 $^1$  Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН  $^2$  Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, факультет фундаментальной физико-химической инженерии

\*e-mail: zvyagina@phyche.ac.ru

Гибридные покрытия на основе оксида графена (ОГ) и наночастиц золота (АиНЧ) представляют большой интерес в качестве усиливающих поверхностей для спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния (ГКР). За счет попадания аналита в поле поверхностных плазмонов АиНЧ реализуется электромагнитный механизм усиления. Адсорбция молекул на листах ОГ увеличивает поляризуемость молекул, что обуславливает химический механизм усиления. В работе предложен подход к получению ГКР-подложек на основе гибридных монослоев восстановленного ОГ (вОГ), модифицированного АuHЧ. Иммобилизацию AuHЧ на листах ОГ проводили путем восстановления HAuCl4 цитратом натрия в присутствии ОГ. Адсорбционные слои ОГ-AuHЧ формировали на межфазной границе гидрозоль/гексан и затем переносили на кремниевые подложки методом вертикального переноса. восстанавливали в микроволновой печи в атмосфере аргона. По данным АСМ прелложенный подход позволяет получать однородные монослои иммобилизироваными AuHЧ диаметром до 15 нм. При этом рост частиц происходит преимущественно на краях листов, что говорит о том, что дефекты в структуре ОГ выступают в качестве центров кристаллизации золота. Возможность использования покрытий для получения ГКР-спектров была подтверждена с помощью родамина 6Ж. Аналит наносили из раствора в количестве, достаточном для формирования на подложке монослоя, заполненного всего наполовину. Пля такой системы были получены хорошо разрешенные ГКР-спектры. В то же время инливилуальные АиНЧ диаметром 18 нм не оказывают влияния на аналит – КР-сигнал маскируется люминесценцией родамина. Использование индивидуального вОГ эффективно тушить люминесценцию аналита, однако усиление недостаточно для регистрации полос КР. Таким образом сочетание вОГ и АиНЧ в единой структуре позволяет получать ультратонкие равномерные ГКР-покрытия, которые эффективно тушат люминесценцию аналитов и значительно усиливают целевой сигнал за счет синергетического эффекта, возникающего между компонентами.

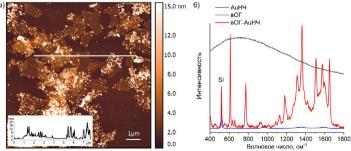


Рис. 1. a) ACM изображение и профиль поверхности монослоя вОГ-AuHЧ, б) КР-спектры родамина 6Ж на поверхности различных подложек.

Данная работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 23-73-00095).

#### Перспективы Бесхлорной Химии Силиконов для Применения в Микроэлектронике и Робототехнике

<u>А.А. Калинина</u> $^{l*}$ , А.Г. Хмельницкая $^{l}$ , И.Б. Мешков $^{l}$ , С.А. Пономаренко $^{l}$ , А.М. Музафаров $^{l}$ 

<sup>1</sup>Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН \*e-mail: kalinina@ispm.ru

Силиконы находят широкое применение в микроэлектронике и робототехнике благодаря уникальной совокупности свойств: химическая и биологическая инертность, стойкость к воздействию УФ, термоокислительная стабильность, хорошие адгезионные и герметизирующие свойства, гидрофобность, гибкость и эластичность, низкие диэлектрические характеристики. В зависимости от структуры и состава полимерной цепи они используются в качестве термостойких и герметизирующих покрытий, залиивочных компаундов. диэлектрических слоев, уплотнителей, клеевых и адгезионных составов, термопаст, мембран, гибких приводов и т.д.

С развитием данных отраслей ужесточаются и требования к чистоте и свойствам используемых материалов. В докладе буду продемонстрированы возможности современных бесхлорных методов получения полиорганосилоксанов для направленного дизайна материалов, применяемых в микроэлектронике и робототехнике.

Данная работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 19-73-30028-П).

## Дизайн Биораспознающих Поверхностей для Применения в Сенсорах для Обнаружения Грибковых Патогенов

<u>В.Б. Крылов</u> $^{l}$ \*, А.Д. Титова $^{l}$ , В. И. Юдин $^{l}$ , Н.Э. Нифантьев $^{l}$ 

<sup>1</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук \*e-mail: v krylov@ioc.ac.ru

В последние десятилетия грибковые инфекции стали глобальной угрозой, сопоставимой по уровню смертности с туберкулезом и малярией. По данным из более чем 120 стран, ежегодно регистрируется около 6,5 млн случаев инвазивных грибковых инфекций, из которых почти 3,8 млн заканчиваются смертельным исходом. 1

Несмотря на выраженную необходимость в ранней диагностике грибковых инфекций, арсенал доступных лабораторных методов для выявления микозов остаётся крайне ограниченным. обусловливает актуальность разработки Это высокочувствительных сенсорных систем, способных распознавать специфические грибковые маркеры в ультранизких концентрациях. Наряду с традиционными методами, такими как иммуноферментный анализ (ИФА) и иммунохроматографический анализ (ИХА), активное развитие получают диагностические платформы, основанные на современных нанофотонных<sup>2</sup> и электрохимических<sup>3</sup> технологиях, реализация которых требует создания различных типов биораспознающих функциональных поверхностей. В настоящем сообщении рассматриваются различные методы иммобилизации биораспознающих молекул (таких как антитела и антигены) на поверхности золотых наночастиц, магнитных микрочастиц, диэлектрических и электрохимических подложек. Плотность, эквимолярность и управляемость представления молекул на поверхности играют исключительно важную роль для воспроизводимости и чувствительности анализа. 4 Особое внимание уделяется стабильности модифицированной поверхности и контролю её связывающей активности. Полученные результаты имеют важное

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение №075-03-2024-401/3 от 30.05.2024 и № 075-00422-24-02 от 28.05.2024 г).

методологическое значение для разработки сенсоров на различных технологических

платформах, предназначенных для детекции грибковых маркеров.

\_

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Denning D.W. Lancet Infect. Dis. 2024, **24**(7), E428-E438.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Alenichev M.K., Levin A.D., Yushina A.A., Kostrikina E.S., Lebedin Y.S., Andreeva I.P., Grigorenko V.G., Krylov V.B., Nifantiev, N. E. *Sens. Bio-Sens. Res.* 2022, **35**, 100475.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Poimanova E.Y., Shaposhnik P.A., Anisimov D.S., Zavyalova E.G., Trul A.A., Skorotetcky M.S., Borshchev O.V., Vinnitskiy D.Z., Polinskaya M.S., Krylov V.B., Nifantiev N.E., Agina E.V., Ponomarenko S.A. *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2022, **14**(14), 16462-16476.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Krylov V.B., Gómez-Redondo M., Solovev A.S., Yashunsky D.V., Brown A.J.P., Stappers M.H.T., Gow N.A.R., Ardá A., Jiménez-Barbero J., Nifantiev N.E., *Cell Surf.* 2023, **10**, 100109.

#### Получение Полисилоксанов с Полярными Группами

E.A. Иванова $^{1}$ ,  $A.\Gamma.$  Хмельницкая $^{2}$ , A.A. Калинина $^{2}$ , A.M. Музафаров $^{2}$ 

<sup>1</sup>Российский технологический университет МИРЭА, <sup>2</sup>Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН \*e-mail: ekanerina.iva@gmail.com

Современные технологии требуют создания новых функциональных материалов, сочетающих гибкость, эластичность и высокую эффективность. Особый интерес представляют диэлектрические эластомерные актюаторы – уникальный класс материалов, способных изменять свою форму под действием электрического поля. Такие материалы открывают широкие возможности для разработки перспективных устройств в области мягкой робототехники, электроники, медицине и адаптивных сенсорных систем. В основном в качестве диэлектрического слоя используют три типа материалов полиуретаны, полиакрилаты, полисилоксаны. Полиорганосилоксаны занимают особое место благодаря сочетанию таких свойств как относительно высокая эластичность, термическая и химическая стабильность, низкая температура стеклования. Все это делает их идеальными кандидатами в качестве мембран для диэлектрических эластомерных актюаторов. Тем не менее, низкая диэлектрическая проницаемость силиконов ограничивает эффективность применения в электроактивных системах. 1 Одним из перспективных направлений решения этой проблемы является химическая модификация полимерной матрицы путем введения полярных нитрогрупп (-NO<sub>2</sub>). Такая модификация позволяет увеличить диэлектрическую проницаемость материала, сохраняя при этом его эластичность и механическую прочность. 2,3

В данной работе будет представлено получение полидиметилсилоксанов, модифицированных 4-нитробензилтиолом и изучение физико-механических, диэлектрических свойств эластомерных материалов на их основе.

$$HO = \begin{pmatrix} CH_3 \\ SI - O \\ CH_3 \\ HC = CH_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} CH_3 \\ SI - O \\ HC = CH_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} CH_3 \\ SI - O \\ NO_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} CH_3 \\ SI - O \\ CH_3 \end{pmatrix}$$

Рис. 1. Схема получения полисилоксанов, модифицированных 4-нитробензилтиолом.

<sup>1</sup> И.В. Безсуднов, А.Г. Хмельницкая, А.А. Калинина, С.А. Пономаренко. *Успехи химии*, 2022, **92**(2), 44.

<sup>2</sup> J. von Szczepanski, G. Siqueira, P. M. Danner, J. Wolf, D. M. Opris. *Adv Mater Tech*, 2023, **8**(3), 10.

<sup>3</sup> E. Perju, S. Shova, D.M. Opris. ACS Appl. Mater. Interfaces, 2020, 12, 23432.

38

# Фотоинициаторы на Основе Фталоцианинатов Фосфора(V) для *in Situ* Фотосшивки Биосовместимых Полимеров

<u>Е.В. Горшков</u>  $^{1,2,3*}$ , А.В. Сочилина $^{2,4}$ , Е.А. Сафонова $^{2}$ , М.А. Половкова $^{2}$ , Ю.Г.Горбунова $^{1,2,3}$ , А.Ю. Цивадзе $^{2,3}$ 

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, факультет фундаментальной физико-химической инженерии; <sup>2</sup>Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук;

<sup>3</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук.

<sup>4</sup>Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова Российской академии наук;

\*e-mail: 19goga99@bk.ru

Гидрогелевые филлеры на основе гиалуроновой кислоты, заполняющие раны непосредственно в организме, способны ускорять восстановление поврежденных тканей и потому представляют собой перспективные материалы для регенеративной медицины и хирургии. Многообещающим методом формирования таких филлеров *in situ* является фотоиндуцируемая сшивка биосовместимых полимеров, инициатором в которой выступает сенсибилизатор, поглощающий свет в терапевтическом окне прозрачности (650-1300 нм) и при этом не обладающий системной и световой токсичностью относительно здоровых клеток.

В ходе работы были синтезированы четыре фотоактивных комплекса фосфора(V) с замещенными фталоцианинами и различными аксиальными лигандами (Рис. 1), водные растворы которых обладают максимумами поглощения в диапазоне 678-722 нм.

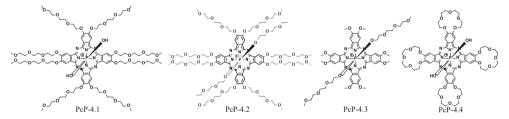


Рис. 1. Молекулярное строение полученных в работе фотоинициаторов

Фотокомпозиции фталоцианинов с гиалуроновой кислотой, модифицированной глицидилметакрилатом, облучали светом с длиной волны 660 нм, варьируя мощность излучения и время воздействия. В результате было продемонстрировано, что все композиции образуют гели. Также обнаружено, что рассматриваемые соединения обладают эффектом фотоиндуцированного нагрева, поэтому для них были измерены максимальные температуры разогрева при облучении и исследован вклад термических процессов на формирование гелей с гиалуроновой кислотой. Комплекс **PcP-4.4** показал наибольшее увеличение температуры (до 77° за 5 минут), а при фотосшивке с охлаждением не образовал геля, что свидетельствует о существенном вкладе термического фактора в процесс сшивки.

Исследование выполнено за счет гранта РНФ № 24-73-10192.

# Синтез Соединений на Основе Силоксанов Различной Архитектуры и Органических Флуорофоров и их Применение в Качестве Сенсоров и Флуоресцентных Меток

A.С. Белова $^{1,2*}$ , Е.Т. Цветкова $^{1,3}$ , Д.С. Ионов $^4$ , В.А. Сажников $^4$ , А.М. Музафаров $^{1,2}$ 

<sup>1</sup>Институт элементоорганических соединений РАН 
<sup>2</sup>Институт синтетических полимерных материалов РАН 
<sup>3</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева 
<sup>4</sup>Центр Фотохимии, Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ 
«Курчатовский институт»

\*e-mail: belova.asya@gmail.com

Актуальной областью исследования является синтез и изучение свойств соединений, совмещающих в себе уникальные свойства силоксановых матриц (термическая и химическая стабильность, широкий рабочий интервал температур, высокая гибкость, оптическая прозрачность, инертность и биосовместимость) и органических флуорофоров (флуоресценция, сенсорные свойства, межфлуорофорные взаимодействия).

В данной работе были синтезированы комбинированные мультихромофорные системы на основе силоксанов различной архитектуры (линейных, циклических, полимерных) и органических флуорофоров (DBMBF<sub>2</sub>, PDI, BODIPY) с уникальными флуоресцентными свойствами. Полученные соединения могут быть использованы в различных областях науки в качестве сенсоров на температуру и полярность среды, в оптике и в OLED-технологиях в качестве компонентов для генерации «белого света», а в материаловедении – в качестве флуоресцентных покрытий, способных реагировать на изменение давления, температуры (Рис. 1)<sup>1-3</sup>.

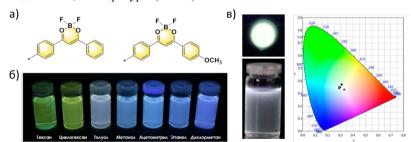


Рис. 1. Структуры органических флуорофоров на основе производных DBMBF<sub>2</sub> (a), эффект влияния полярности растворителя на флуоресценцию (б), «белая» флуоресценция в растворе и твердом виде (в)

Также, функциональные производные органических флуорофоров являются удобными флуоресцентными метками и могут позволить решить проблему детектирования остаточных функциональных групп в кремнийорганических соединениях (Si-H, Si-OH, Si-Vin) с помощью фотометрических методов исследования, что достаточно сложно сделать с помощью методов ЯМР- и ИК-спектроскопии из-за их низкой чувствительности.

Данная работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 21-73-30030).

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Belova A.S. et al. *Polymers*, 2022, **14**, 5075.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Belova A.S. et al. *Dyes and Pigments*, 2022, **208**, 110852.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Belova A.S. et al. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2023, **127**, 5881.

## Биоэлектронные Интерфейсы на Основе Лазерно-Индуцированных Гибридов Углеродных Наноматериалов

А.Ю. Герасименко $^{1,2*}$ 

<sup>1</sup>НИУ МИЭТ, лаборатория «Биомедицинские нанотехнологии»
<sup>2</sup> Сеченовский университет, Лаборатория биомедицинских нанотехнологий \*e-mail: gerasimenko@bms.zone

Регистрация электрических сигналов позволяет выявлять и предотвращать серьезные заболевания сердечно-сосудистой и нервной систем организма. Для этого необходима непрерывная диагностика в течение длительного времени, а в некоторых случаях, электрическая стимуляция. Классические электроды с использованием электропроводящего геля не подходят для длительного использования. В связи с этим, в качестве интерфейсов между электронным прибором и биотканью, получили распространение сухие электроды с покрытиями на основе металлов ввиду низкого импеданса на границе кожа-электрод. Однако, такие электроды не обладают достаточной биосовместимостью и стабильностью, а также совместимостью с рельефом поверхностных и внутренних биотканей. Миниатюризация устройств диктует уменьшение площади контакта интерфейса за счет увеличения удельной поверхности. Ещё одним требованием является пористость интерфейсов для эффективного потоотделения при сохранении электрофизических свойств.

Обеспечение таких требований достигаются за счёт изготовления интерфейсов из углеродных наноматериалов (графен, нанотрубки) и гибких композитов на их основе. Достижение высокой гибкости и превосходных механических и электрических свойств таких композитов обусловлено способностью наноматериалов образовывать sp2- и sp3-гибридизованные связанные структуры с делокализованными электронами. Проблемой композитов является отсутствие связанного расположения наноматериалов, следствием чего является малое случайное количество узлов перколяции. Ранее получено эффективное использование слоев из гибридных наноструктур на основе углеродных нанотрубок и восстановленного оксида графена (ОУНТ/ВОГ) для формирования электропроводящих межсоединений с разными топологиями на кремниевой подложке, а также увеличение их электропроводности на 3 порядка в результате формирования лазерным воздействием каркасных наноструктур<sup>1</sup>. Такие слои могут быть сформированы на гибких полимерных подложках и внедрены в полимерную матрицу в виде перколяционной сети. Лазерное формирование композиционных полимеров позволяет снизить сопротивление более 10 раз. а также обеспечить регулирование размеров и количества пор при нелинейно-оптическом взаимодействии импульсного лазерного излучения с нанотрубками и графеном в полимерной матрице. Поэтому лазерно-индуциорованные материалы хорошо себя зарекомендовали в качестве интерфейсов для регистрации биопотенциалов. Установлено, что выдерживание интерфейсов в суспензии, имитирующей пот, в течение 7 дней привело к увеличению импеданса не более чем на 5 % по сравнению с интерфейсами на основе металлов. Показана биосовместимость интерфесов при инкубации клеток фибробластов человека. Полученные результаты свидетельствуют о возможности использования биоэлектронных интерфейсов на основе гибридов углеродных наноматериалов для долговременного контакта с биотканью.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 25-29-00938 от 26.12.2024).

-

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Gerasimenko A.Yu. et al. *Nanomaterials*. 2021, **11**, 1875.

## Прогнозирование Заболеваемости Туберкулезом на Основе Количественного Анализа Выдыхаемого Воздуха

 $\underline{\textit{B.Д. Пойманов}}^{l^*}$ , А.А.  $\textit{Труль}^l$ , Е.Ю. Пойманова $^l$ , Е.В.  $\textit{Агина}^l$ 

<sup>1</sup>Институт синтетических полимерных материалов РАН \*e-mail: v.poymanov@ispm.ru

В период роста заболеваемости туберкулезом на фоне милитаризации общества актуализируется спрос на наиболее простую, быструю и неинвазивную диагностику. Сбор выдохов пациентов с последующим их количественным анализом практикуется сравнительно недавно, но уже показал некоторую степень корреляции с наличием заболевания<sup>1</sup>. Качество прогноза зависит, прежде всего от стабильности работы газочувствительных сенсоров, что относится к аппаратной части исследования. Эти сенсоры дают некоторый портрет состава выдыхаемого воздуха, представляющих собой набор данных – их сопротивлений при выдохе. С другой стороны - полученные данные требуют количественной обработки и получения по ним критерия заболеваемости. Это, в свою очередь, требует репрезентативной и качественной выборки данных.

На этом основании возможно каждому набору данных поставить в пространстве соответствующих признаков точку с некоторыми координатами. Полученная выборка, таким образом, представляет собой набор точек, характеризующийся бинарным признаком (болен-здоров). Гипотеза разделяемости заключается в том, что точки могут быть разделены по этому признаку вне зависимости от посторонних факторов (либо, если таковые имеются, их следует выявить).

Кроме того — существует также проблема искажения данных при извлечении. Изначально неэксплуатируемый прибор дает хорошую разделяемость. Однако в период эксплуатации она падает, что проявляется, во-первых, в систематическом дрейфе средних значений, а во-вторых — в больших относительных флуктуациях. Эти факторы сильно зашумляют данные, делая признаки неразделимыми.

В этой связи актуализируется вопрос о наиболее устойчивых математических методах дискриминации. До некоторых пор в исследовании использовались методы линейного дискриминантного анализа, который является наиболее простым и универсальным, и широко используемым при аналогичных исследованиях. Использование нелинейных моделей, с одной стороны, позволяет улучшить качество прогноза. Однако с другой – требует понимания подхода к решению нелинейных систем и может быть неустойчив к выборке данных.

Данная работа выполнена при поддержке Гос.задания № FFSM-2025-0001

\_

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Пойманова Е.Ю., Абрамов А.А., Пойманов В.Д., Труль А.А., Бойко Я.Ю., Ушакова Н.Б., Шипулин Г.А., Юдин С.М., Агина Е.В. *Лабораторная служба*. 2024; **13**(4): 12–20.

#### Многомасштабное Моделирование в Органических Супрамолекулярных Системах

H.О. Дубинец $^{1*}$ , А.Ю. Сосорев $^{1}$ 

<sup>1</sup>Институт синтетических полимерных материалов РАН \*e-mail: nikita.dubinets@gmail.com

Теоретическое моделирование позволяет значительно сократить затраты времени и материальных ресурсов на проведение экспериментов. В настоящее время существуют различные подходы для расчетов параметров молекул в фотоактивных системах, в частности способы описания структур растворителей / окружения возбуждающейся молекулы. Данные подходы строятся на представлении окружения в виде точечных зарядов, либо в виде молекулярно-механических силовых полей. Ещё одним вариантом являются так называемые «фрагментные» методы, в частности ЕFP (Эффективные фрагментные потенциалы), FMO (Фрагментные молекулярные орбитали), в которых система делится на фрагменты, и рассчитывается их взаимодействия.

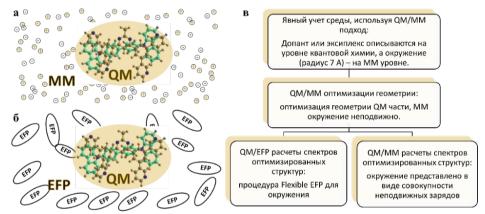


Рис. 1. Явный учет окружения, используя (a) QM/MM, (б) QM/EFP подходы и (в) блоксхема многомасштабного моделирования.

В докладе будут представлены и оценены возможности применимости методик многомасштабного компьютерного моделирования для расчета энергетических и спектроскопических свойств новых функциональных материалов, использующихся в оптических сенсорах, органической электронике и молекулярных компьютерах - от биомолекул до органических светодиодов.

Данная работы выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования  $P\Phi$  (проект № FFSM-2025-0004).

## Предсказание Аффинности Белок-Белковых Взаимодействий с Использованием Нейросетевого Алгоритма ProbAN

<u>Е.А. Богданова  $^{l*}$ , А.К. Шайтан  $^{l}$ , В.Н. Новоселецкий  $^{l}$ </u>

<sup>1</sup>Московский Государственный Университет, Биологический факультет, кафедра Биоинженерии

\*e-mail: eabogdanova.bioinf@gmail.com

Белок-белковые взаимодействия играют ключевую роль в регуляции клеточных процессов, включая сигнализацию, репликацию ДНК и иммунный ответ. Их изучение имеет важное значение для разработки новых терапевтических стратегий, включая создание биосовместимых материалов и систем доставки лекарств. Однако экспериментальные методы определения аффинности связывания, такие как изотермическая титрационная калориметрия или поверхностный плазмонный резонанс, требуют значительных временных и финансовых затрат. В связи с этим разработка вычислительных методов предсказания аффинности взаимодействия биополимеров становится критически важной задачей, особенно в контексте интеграции биоинформатики и биосовместимых технологий.

В данной работе представлен новый алгоритм ProBAN, основанный на сверточных нейронных сетях с 3D конволюционными слоями, который предсказывает аффинность в белковых комплексах по их пространственным структурам. Также разработан новый метод предобработки 3D-структур биомолекул, в котором интерфейс взаимодействия автоматически локализуется в трехмерной ограничительной ячейке, что позволяет модели анализировать сложные пространственные паттерны, имеющие ключевое значение для понимания механизмов связывания в биомолекулярных системах.

Результаты тестирования показали высокую точность предсказаний: корреляция Пирсона составила 0,60 для внутреннего тестового набора и 0,55 для внешнего, что превосходит существующие аналоги, такие как PRODIGY и PPI-Affinity. Особое внимание уделено применению алгоритма для анализа комплексов АСЕ2-RBD спайкового белка коронавируса, где продемонстрирована его способность оценивать влияние точечных мутаций на энергию связывания, что актуально для разработки противовирусных препаратов. Разработанный алгоритм также успешно применен для оценки стабильности гистоновых комплексов, включающих каноничные и замещающие варианты гистонов. Так, предсказаны варианты гистонов, которые усиливают и, напротив, снижают стабильность нуклеосомы. Полученные результаты согласуются с экспериментальными данными и открывают новые возможности для изучения эпигенетической регуляции.

Предлагаемые в данном исследовании методы могут быть использованы для проектирования биосенсоров, основанных на белковых взаимодействиях, или для оптимизации биоматериалов с заданными свойствами. В частности, точное предсказание аффинности белок-белковых взаимодействий позволит разрабатывать более эффективные системы доставки лекарств или создавать биосовместимые покрытия для медицинских имплантатов.

Данная работы выполнена при поддержке РНФ (проект № 25-14-00046).

Стендовые доклады

#### Композитные Наноматериалы для Биомедицины

<u>Л.П. Ичкитидзе</u> $^{l,2*}$ , К.В. Кукшинова $^l$ , А.Ю. Герасименко $^{l,2}$ , Д.В. Телышев $^{l,2}$ , С.В. Селищев $^2$  <sup>1</sup>Первый МГМУ им. И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский Университет)  $^2$ Национальный исследовательский университет «МИЭТ» \*e-mail: leo852@inbox.ru ichkitidze\_1 p@staff.sechenov.ru

Электропроводящие полимерные композитные наноматериалы обладают свойствами, которые сильно востребованы в медицинской тераностике. Особенное внимание заслуживают полимерные композиционные наноматериалы, содержащие углеродные нанотрубки в связи с их огромным потенциалом для решения широкого спектра медицинских задач, в частности: биосенсоров, адресной доставки медицинских препаратов, регенерации тканей, восстановления функции периферических нервов при нейродегенеративных заболеваниях (радикулопатия), или при их травматизации, электроды для электрокардиографа (ЭКГ) или для электроэнцефалографа (ЭЭГ).

Были приготовлены и исследованы суспензионные и сухие образцы в составе полимерных, в том числе биологических, материалов и многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ). В качестве матриц служили бычий сывороточный альбумин (БСА) микрокристаллическая целлюлоза (МКЦ), коллаген, акриловая краска (АК), разбавитель акриловой краски (РАК), а наполнителем были МУНТ типа «Таунит МД».

Водные суспензии образцы на основе биологических материалов содержали: 1,98 мас.% МУНТ//17,19 мас.% БСА, 2,17 мас.% МУНТ//2,17 мас.% МКЦ и 2,01мас.% МУНТ//2,53мас.% коллаген. Другие суспензионные образцы имели состав: 2,08 мас.% МУНТ//97,92мас.% АК и 2,13мас.% МУНТ//97,87 мас. % РАК. Все суспензионные образцы получали путём применения известных методик маршрутной карты нанотехнологии (магнитное перемешивание, ультразвуковая (УЗ) баня, УЗ диспергатор и др.). Часть суспензий подвергались сушению при температуре 45 °С в течение 200 ч. Контрольными образцами считались те же суспензии или высушенные образцы, но не содержащие МУНТ.

Удельная электропроводность  $\sigma$  суспензионных образцов измерялась портативным кондуктометром, который также измерял температуру t s диапазоне  $0\div60$  °C. Для высохших образцов электропроводность оценивалась двухзондовым методом.

Установлено, что электропроводность суспензии содержащих МУНТ сильно зависит от степени ее диспергации, в частности, при  $t\approx20$  °C после процедуры магнитного перемешивания значение  $\sigma$  увеличивалось в 3÷5 раза, после УЗ бани ещё 4÷5 раз, а после воздействия УЗ диспергатора еще 4÷5 раза. При  $t\approx40$  °C для суспензионных образцов в составе биологических материалов и МУНТ реализована  $\sigma\sim0.06\div0.09$  См/м, а в суспензиях 2,08 мас. % МУНТ//97,92 мас. % АК и 2,13 мас. % МУНТ//97,87 мас. % РКА  $-0.3\div0.8$  См/м. В контрольных суспензионных образцах фиксировались значение  $\sigma<0.01$  мСм/м.

В процессе получения сухих образцов сильно уменьшался их вес  $-5 \div 28$  раз относительно первоначальному весу суспензии. При этом в контрольных образцах значение  $\sigma$  не фиксировалось до уровня  $10^{-8}$  См/м, а в образцах, содержащих МУНТ и биологических материалов (БСА, МКЦ, коллаген)  $-\sigma \sim 0.002 \div 0.02$  См/м. Высокие значения  $\sigma \sim 0.3 \div 3$  См/м реализовались в образцах, содержащих АК или РАК и МУНТ.

Отметим, что композитные наноматериалы в составе биосовместимых материалов и МУНТ в связи их гидрофильности перспективны, как биоразлагаемые или биорезорбируемые электропроводящие импланты различного назначения (костная ткань и др.), а наноматериалы в составе акриловой краски или разбавителя акриловой краски и МУНТ в связи их гидрофобностью перспективны как электроды в различных медицинских изделиях (нейростимуляторы, ЭКГ, ЭЭГ и др.).

## Нейроинтерфейс на Основе Электропроводящих Биополимеров Полученный Методом Фотолитографии

M.С. Савельев $^{1,2*}$ , П.Н. Василевский $^{l}$ , Е.П. Оцупко $^{l}$ , А.Ю. Герасименко $^{l,2}$ 

<sup>1</sup> Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Институт биомедицинских систем

<sup>2</sup> Первый Московский государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова, Институт бионических технологий и инжиниринга \*e-mail: savelyev@bms.zone

Предотвращение ложных сигналов фантомной боли после ампутации конечности имеет решающее значение. Разработка нейроинтерфейсов, способных полдерживать обратную связь для обмена информацией между мозгом и внешними устройствами, а также долгосрочное использование, является одним из ключевых приоритетов исследований. Основная проблема существующих устройств заключается в возможном образовании рубцовой ткани и гибели соседних нейронов. Для решения этой проблемы создан полимерный композит на основе нового состава: хитозан, бычий сывороточный альбумин, однослойные углеродные нанотрубки и эозин Н, из которого изготовлен нейроинтерфейс. Полимерный композит необходимой формы сформирован методом фотолитографии. При исследовании его нелинейных оптических свойств обнаружен новый эффект фазовой самомодуляции, который наблюдается после воздействия лазерного излучения до формирования композита. 1 Измерено время появления дифракционных колец. Это позволило оптимизировать параметры лазера, такие как скорость и интенсивность сканирования. Полученный однородный композит показал **у**дельную проводимость 20  $MCM \cdot cM^{-1}$ , достаточную для передачи электрофизиологического сигнала.

Фотолитография проведена с применением наносекундных импульсов длительностью 200 нс при частоте повторения импульсов 30 к $\Gamma$ ц. Нелинейный показатель преломления достигает значений  $9.5\cdot 10^{-11}$  см²/Вт, что указывает на сильное рассеяние возникающие на границе раздела сред с разным значением этого коэффициента. Такое когерентное рассеяние света приводит к увеличению оптической длины пути внутри образца. Эти данные подтверждают значимость выявленного эффекта самомодуляции фазы, который усиливает нелинейное поглощение. Сечение нелинейного поглощения достигло 515  $\Gamma$ M при значении пороговой мощности лазера 240 мВт. Исследование факзовой самомодуляции направлено на достижение равномерного распределения свойств гидрогеля в области облучения и получение методом фотолитографии образцов симметричной формы.

Методами ИК спектроскопии и комбинационного рассеяния установлено, что хитозан и бычий сывороточный альбумин, содержащие катионные группы, образуют ионные взаимодействия с анионами эозина Н, сопровождающиеся образованием водородных связей. Одностенные углеродные нанотрубки дополнительно соединяются посредством слабых сил Ван-дер-Ваальса, выступая в качестве вторичных механизмов стабилизации, что подтверждается спектроскопическим анализом.

Работа выполнена в рамках крупного научного проекта при финансовой поддержке Российской Федерации в лице Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках соглашения No 075-15- 2024-555 от 25 апреля 2024 года.

\_

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Savelyev M.S., Kuksin A.V., Murashko D.T., Otsupko E.P., Suchkova V.V., Popovich K.D., Vasilevsky P.N., Vasilevskaya Y.O., Kurilova U.E., Eganova E.M., Edelbekova P.A., Selishchev S.V., Pavlov A.A., Gerasimenko A.Yu. *Polymers* 2025, **17**(10), 1300-1-18.

#### Получение Цианосодержащих ПДМС в Качестве Диэлектрических Эластомеров

<u>А.Г. Хмельницкая</u> $^{l*}$ , Е.А. Иванова $^{2}$ , Г.С.Казарян $^{l}$ , А.А. Калинина $^{l}$ , С.А. Пономаренко $^{l}$ , А.М. Музафаров $^{l}$ 

<sup>1</sup>Институт синтетических полимерных материалов РАН
<sup>2</sup> Российский технологический университет МИРЭА
\*e-mail: alina.khmelnitskaya@ispm.ru

Полисилоксаны широко используются во многих направлениях, таких как косметическая промышленность, электроника, биомедицина, искусственные мышцы и др. 1,2,3 Такое разнообразие применений обусловлено уникальными свойствами полисилоксанов: возможность работать в широком диапазоне температур, атмосферостойкость, инертность, гидрофобность, химическая устойчивость, низкая диэлектрическая проницаемость и т. д. Для расширения свойств ПДМС в основную цепь вводят различные модифицирующие группы. 4,5

В данной работе будут представлены результаты синтеза полидиметилсилоксана, модифицированного 3-маркаптопропилонитрилом (рис.1), получения на его основе эластомерных материалов и исследования их электрических и физико-механических характеристик.

Рис. 1. Получение цианосодержащих ПДМС

Анализ продуктов проводили с использованием комбинации физических и химических методов исследования (спектроскопия ЯМР, ГПХ, ДСК, ИК). В работе исследовано влияние соотношения компонентов композиций, а также температура их отверждения на свойства получающихся пленок.

Данная работы выполнена при поддержке РНФ (проект № 19-73-30028-П).

<sup>1.</sup> I.V. Bezsudnov, A.G. Khmelnitskaia, A.A. Kalinina, S.A. Ponomarenko. *Russ Chem Rev*, 2023, **92**, RCR5070.

<sup>2.</sup> Hu, P., Madsen, J., Skov, A. L. Nature communications, 2022, 13(1), 370.

<sup>3.</sup> A. Olejnik, B. Sztorch, D. Brzakalski, R.E. Przekop. Materials (Basel) 2022, 15.

<sup>4.</sup> J. von Szczepanski, G. Siqueira, P. M. Danner, J. Wolf, D. M. Opris. *Adv Mater Tech*, 2023, **8**(3), 10.

<sup>5.</sup> E. Perju, S. Shova, D.M. Opris. ACS Appl Mater Interfaces, 2020, 12, 23432.

Авторский указатель

Абрамов, А.А. Аверин, А.А. Агина, Е.В. Андреев, М.Д. Анисимов, Д.С.	Б	22 24 35 13 15 21 22 24 26 27 29 31 32 33 34 42 23 22	Калинина, А.А. Кешек, А.К. Костров, С.А. Крамаренко, Е.Ю. Красников, Д.А. Кретова, Е.А. Кривецкий, В.В. Крылов, В.Б. Кукшинова, К.В. Кулешов, А.А.		36 38 49 21 30 32 33 12 12 26 34 21 29 23 37 46 15 28 31
Белова, А.С. Богданова, Е.А. Борщев, О.В. Быстрова, А.В.		40 18 44 22 25 10	Лупоносов, Ю.Н.	Л	16
Василевский, П.Н.	В	48	Марков, А.Г. Мельников, С.А. Мешков, И.Б. Михайлов, М.С.	M	19 27 36 47
Гайдаржи, В.П. Герасименко, А.Ю. Горбунова, Ю.Г. Городов, В.В. Горшков, Е.В. Гребенкина, А.А. Гречина, А.В.	Γ	22 26 41 46 48 11 39 12 39 23 19	Музафаров, А.М. Нагорный, В.А. Наджарьян, Т.А. Назаренко, А.Г. Новоселецкий, В.Н		10 36 38 40 49 34 12 15 28 44
Дубинец, Н.О.	Д	22 43	Оленич, Е.А. Оцупко, Е.П.	0	12 48
Ерофеев, А.С.	E 3	15	Пойманов, В.Д. Пойманова, Е.Ю.	П	27 42 13 15 21 27 29 31 32 33 42
Заборин, Е.А. Завьялова, Е.Г. Звягина, А.И.	3	25 13 14 21 29 30 33 17 35	Полинская, М.С. Половкова, М.А. Пономаренко, С.А.		22 39 13 22 25 29 31 32 36 47 49
Иванова, Е.А. Ионов, Д.С.	И	38 49 40	Радыгин, К.О.	P C	35
Ичкитидзе, Л.П. ККазарян, Г.С. Калинина, М.А.	K	49 17 35	Савельев, М.С. Сажников, В.А. Сафонова, Е.А. Селищев, С.В.	-	48 40 39 46

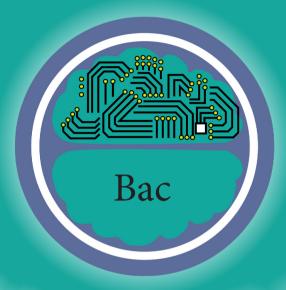
Скворцов, Д.А. Скоротецкий, М.С. Сосорев, А.Ю. Сочилина, А.В.	31 33 22 29 22 43 39
<b>Т</b> Таиров, Г.Н. Телышев, Д.В. Титова, Я.О. Тоиров, С.Х. Труль, А.А.	15 28 19 46 32 22 22 25 26 32 34 42
<b>у</b> Умрюхин, А.Е.	19
<b>Х</b> Хмельницкая, А.Г. Худалов, Т.Т.	36 38 49 15 28
<b>Ц</b> Цветкова, Е.Т. Цивадзе, А.Ю.	40 39
<b>Ч</b> Чвалун, С.Н.	10
Шайтан, А.К. Шапошник, П.С. Шевченко, В.Г.	18 44 13 25 12
<b>Щ</b> Щербина, М.А.	10
<b>Ю</b> Юсуповская, Е.А.	19

















ООО Технологии Печатной Электроники 117393 Москва, Российская Федерация ул. Профсоюзная 70с1, оф. 410

- Phone: +7 (495) 332-58-40
- http://www.printeltech.com