

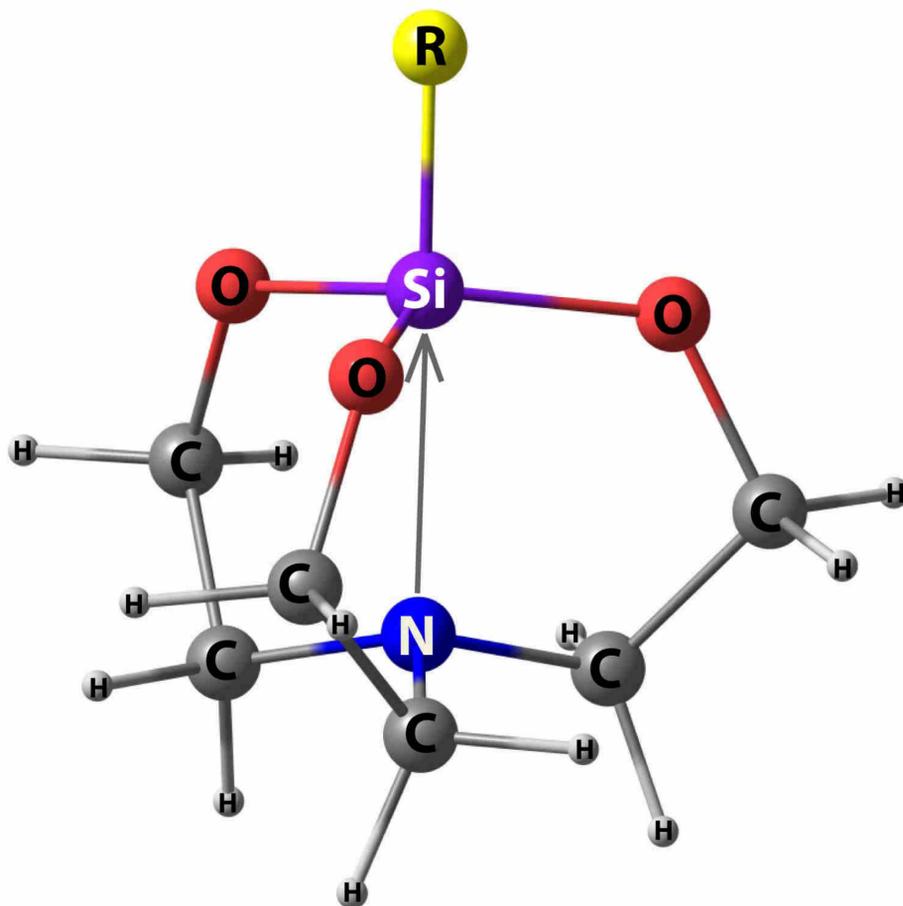
20 декабря 2018

Ученые Иркутского института химии им. А. Е. Фаворского СО РАН занимаются компьютерным прогнозированием физико-химических свойств химических соединений, перспективных в биологии, медицине и других областях. Результаты их работы можно использовать для изучения биохимических процессов с участием электрона и создания наноразмерных электромеханических систем и приводов (например, молекулярных машин и искусственных мышц).

«Одно из направлений, которыми мы занимаемся, это изучение строения и свойств обширного ряда металлатранов, в частности силатранов. Силатраны относятся к внутримолекулярным комплексам атома кремния. В свое время в классической теории строения подобные структуры отрицались: как правило, кремний был окружен четырьмя атомами. Однако потом удалось получить органические соединения кремния, в ближайшем окружении которого было пять атомов. Оказалось, что такие соединения имеют необычные свойства и структуру», — рассказывает ведущий научный сотрудник ИриХ СО РАН доктор химических наук, профессор Валерий Фёдорович Сидоркин.

Особый интерес к силатранам проснулся, когда исследователи под руководством академика Михаила Григорьевича Воронкова (директора Иркутского института органической химии СО АН СССР в 1970—1994 гг.) на примере этих комплексов развеяли миф о биологической инертности соединений кремния. Силатраны нашли применение во многих областях. В медицине известна их антибактериальная, противовоспалительная, противоопухолевая, фунгицидная (против грибов и спор) активность. В сельском хозяйстве они используются как стимуляторы роста, а в промышленности — как усилители склеивания для отверждаемых силиконовых композиций и электроизоляционные пленочные покрытия.

«Практически каждый год исследователи открывают у силатранов всё новые и новые свойства. В значительной степени это обусловлено многообразным проявлением каркасного строения таких соединений и наличием в их высокополярных молекулах чрезвычайно чувствительной к внешним факторам координационной связи атомов кремния и азота. Изучая электрохимическое окисление силатранов, мы вместе с коллегами из университета Ренн-1 (Франция) под руководством доктора химических наук, профессора Вячеслава Викторовича Жуйкова обнаружили присущие им неожиданные особенности», — говорит Валерий Сидоркин.



Молекула силатрана

Так, благодаря разработанной учеными вертикальной модели адиабатической ионизации удалось объяснить, как окисление силатранов зависит от природы заместителя атома кремния (что не получалось сделать ранее). «В случае с некоторыми заместителями при удалении электрона от силатрана расстояние между атомами азота и кремния оказалось способным увеличиваться. А при обратном присоединении электрона — уменьшаться до начального значения. Таким образом, по электрохимическому сигналу совершается механическое действие, то есть изменяются линейные размеры молекулы. В перспективе силатраны можно использовать для создания искусственных мышц», — говорит Валерий Сидоркин.

Вторая работа была сделана совместно с группой профессора К. Боуэна из Университета Джонса Хопкинса (США) — в ней изучались дипольно-связанные ионы и рассматривалось взаимодействие пучка электронов с силатранами. Дело в том, что электрон, который налетает на молекулу, может соединяться с ней по-разному: быть локализованным внутри нее либо, как в случае с некоторыми силатранами, располагаться снаружи и быть связанным с ней ее электрическим полем. Последнее приводит к образованию дипольно-связанных анионов. Ученые исследовали, как именно они образуются и к каким эффектам приводят. Все расчеты были сделаны в Иркутске, а эксперименты поставлены в США. Специально под эту задачу американские ученые разработали новую экспериментальную методику. «Рассчитанный нами фотоэлектронный спектр дипольно-связанных анионов полностью совпал с экспериментальным, что позволяет надежно судить об их структуре и делать прогнозы без эксперимента», — комментирует Валерий Сидоркин. — Кроме того, мы впервые обнаружили, что добавочный электрон, локализованный вне молекулы, оказывает сильнейшее влияние на геометрию нейтральной молекулы. Этот результат не укладывается в рамки стандартных представлений о строении данных соединений».

Такие исследования важны для биохимии. В живых организмах очень много процессов, которые инициируются электронами. Знания о том, как они протекают, могут способствовать разработке методик лечения и лекарств. Другой интерес связан с супермолекулами, которые находят, в том числе и в космическом пространстве. Изучение дипольно-связанных анионов — чуть ли не единственная возможность исследовать структуру таких кластеров и понять, как они образуются. Кроме того, открытые сибирскими учеными эффекты перспективны с точки зрения использования в нанозлектронике.

Диана Хомякова

Изображение предоставлено Валерием Сидоркиным