

# **Самаркина Дарья Александровна**

Отчет за 3 семестр обучения

Направление подготовки	04.06.01 Химические науки
Направленность (специальность)	02.00.04 - Физическая химия
Научный руководитель	д.х.н., профессор Захарова Л.Я.
Лаборатория	высокоорганизованных сред
Тема научно-исследовательской работы	Супрамолекулярные системы на основе катионных ПАВ, содержащих природный фрагмент: агрегационные свойства и комплексообразование с биомолекулами

## **Образовательный процесс:**

<b>2 курс</b>	
Дисциплина «Физическая химия»	Программа кандидатского экзамена

## **Научно-исследовательская работа:**

Комплексом физико-химических методов исследованы бинарные системы на основе гомологического ряда имидазолсодержащих амфифилов с варьируемой длиной гидрофобного радикала (12, 14, 16 и 18 атомов углерода) и модельного белка, в качестве которого использовался бычий сывороточный альбумин (БСА). Исследования проводились при варьировании концентрации ПАВ и трех фиксированных концентрациях белка (0.05%, 0.1% и 1% по массе). Изучены агрегационные характеристики данных систем, характер взаимодействия компонентов в системе, а также функциональные свойства образуемых комплексов.

Выявлены следующие закономерности:

1. Для изученных систем ПАВ/полимер характерно наличие двух критических точек агрегации, что отражает формирование смешанных систем ПАВ/полимер и свободных мицелл ПАВ.
2. Добавление белка к растворам ПАВ способно снижать пороги агрегации систем в 10-20 раз, причем наиболее выраженный синергетический эффект наблюдается для более низкой концентрации БСА.
3. Размеры комплексов ПАВ-БСА имеют стабильный размер (гидродинамический диаметр 10-12 нм) и не зависят ни от концентрации ПАВ, ни от концентрации белка, а определяются размером самой белковой макромолекулы.
4. Между компонентами бинарных систем ПАВ/БСА в качестве одного из возможных механизмов реализуется электростатический механизм связывания.

5. Солюбилизационная способность для комплексов ПАВ-БСА (0.05%) выше, чем для индивидуальных ПАВ, но уменьшается с увеличением концентрации БСА.
6. Методом флуоресцентной спектроскопии определено, что связывание компонентов бинарной системы ПАВ/БСА происходит преимущественно по триптофановому аминокислотному остатку белковой макромолекулы.
7. Тушение флуоресценции БСА добавками ПАВ имеет динамическую природу и протекает с участием триптофановых остатков, локализованных на поверхности белковой макромолекулы.

### **Результативность НИР:**

#### **Публикации (рекомендованные ВАК):**

1. Novel cationic pyrimidinic surfactant: Self-assembly and DNAcomplexation / D. Gabdrakhmanov, D. Samarkina, V. Semenov, V. Syakaev, R. Giniyatullin, N. Gogoleva, L. Zakharova // Colloids Surf., A – 2015. – V. 480. – P. 113-121.
2. Супрамолекулярные системы на основе дикарионного пиридинсодержащего ПАВ и полиэтиленамина / Д.Р. Габдрахманов, Д.А. Самаркина, Ф.Г. Валеева, Л.Ф. Сайфина, В.Э. Семенов, В.С. Резник, Л.Я. Захарова, А.И. Коновалов // Изв. Акад. Наук. Сер.хим. – 2015. – № 15. – С. 573-578.
3. Cationic surfactant with 1,2,4-triazole- and uracil moieties as amphiphilic building blocks for supramolecular nanocontainers / D.R. Gabdrakhmanov, D.A. Samarkina, V.E. Semenov, E.S. Krylova, V.S. Reznik, L.Ya. Zakharova // J. Mol. Liq. – 2016. – V. 218. – P. 255–259.
4. Супрамолекулярные катализаторы на основе нового пиридинофана: влияние добавок полимера и ионов лантана / Д.Р. Габдрахманов, Ф.Г. Валеева, В.Э. Семенов, Д.А. Самаркина, А.С. Михайлов, В.С. Резник, Л.Я. Захарова // Макрогетероциклы – 2016. – Т. 9. – № 1. – С. 29-33.
5. Самоорганизующиеся каталитические системы на основе нового амфифила содержащего пуриновый фрагмент, проявляющие субстратную специфичность в гидролизе эфиров кислот фосфора. / Д.А. Самаркина, Д.Р. Габдрахманов, В.Э. Семенов, Ф.Г. Валеева, Л.М. Губайдуллина, Л.Я. Захарова, В.С. Резник, А.И. Коновалов // ЖОХ – 2016. – Т. 86. – Вып. 3. – С. 518–522.
6. Substrate specific nanoreactors based on pyrimidine-containing amphiphiles of various structures for cleavage of phosphonates / D.R. Gabdrakhmanov, D.A. Samarkina, V.E. Semenov, L.F. Saifina, F.G. Valeeva, V.S. Reznik, L.Ya. Zakharova // Phosphorus Sulfur Silicon Relat. Elem. – 2016. – V. 191 (11-12). – P. 1673-1675.

## **Тезисы:**

1. Самоорганизация и функциональная активность нового пиридинсодержащего амфифила и его бинарной смеси с цетилтриметиламмоний бромидом / Д.Р. Габдрахманов, Д.А. Самаркина, В.Э.Семенов, Л.Я. Захарова // Сборник тезисов Всероссийской школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века». Казань, 11-12 декабря 2014 г. – С.197.
2. Агрегационные характеристики супрамолекулярных систем на основе дитерпеноидных амфифилов: влияние длины спейсерного фрагмента / Д.А. Самаркина, Э.А. Васильева, Ф.Г. Валеева, Д.Р. Габдрахманов, И.Ю. Стробыкина, В.Е. Катаев, Л.Я. Захарова // «Химическая технология функциональных наноматериалов». Сборник трудов всероссийской молодежной конференции с международным участием. Москва РХТУ им. Д.И. Менделеева 26-27 ноября 2015г. – С. 175.
3. Новый тетракатионный амфи菲尔 с пиридиновым фрагментом: самоорганизация и функциональная активность / Д.Р. Габдрахманов, Д.А. Самаркина, В.Э. Семенов, Л.Ф. Сайфина, В.С. Резник, Л.Я. Захарова // III Всероссийский симпозиум с международным участием по поверхностно-активным веществам, тезисы докладов. Санкт-Петербург, 29 июня-1 июля 2015 г. – С. 129.
4. Новые катионные амфифилы с пиридиновым фрагментом: самоорганизация и функциональная активность / Д.Р. Габдрахманов, Д.А. Самаркина, М.П. Донбаев, В.Э. Семенов, Р.Х. Гиниятуллин, В.С. Резник, Л.Я. Захарова / Итоговая конференция КНИТУ 2014, Научная сессия. Аннотации сообщений. Казань, 2-8 февраля 2015 г. – С. 5-6.
5. Агрегационное поведение и функциональная активность пиридинсодержащих амфифилов с пространственно загруженной головной группой / Д.Р. Габдрахманов, Д.А. Самаркина, В.Э. Семенов, Р.Х. Гиниятуллин, В.С. Резник, Л.Я. Захарова // X Всероссийская школа-конференция молодых ученых «Теоретическая и экспериментальная химия жидкокристаллических систем» (Крестовские чтения), Тезисы докладов. Иваново, 26-30 октября 2015 г. – С.97.
6. Агрегационные характеристики и функциональная активность амфи菲尔ного мультигетероцикла / Д.А. Самаркина, Д.Р. Габдрахманов, В.Э. Семенов, Л.Ф. Сайфина, В.С. Резник, Л.Я. Захарова // Итоговая конференция КНИТУ 2015, Научная сессия. Аннотации сообщений. Казань, 2-6 февраля 2016 г. – С. 7.
7. Закономерности изменения агрегационных характеристик и функциональной активности в ряду пиридинсодержащих амфифилов / Д.Р. Габдрахманов, Д.А. Самаркина, В.Э. Семенов, Ф.Г. Валеева, В.С. Резник, Л.Я. Захарова // Итоговая конференция КНИТУ 2015, Научная сессия. Аннотации сообщений. Казань, 2-6 февраля 2016 г. – С. 7
8. Substrate specific nanoreactors based on pyrimidine-containing amphiphiles of various structures for cleavage of phosphonates / D.R. Gabdrakhmanov,

- D.A. Samarkina, V.E. Semenov, F.G. Valeeva, L.Ya. Zakharova, V.S. Reznik // The 21st International Conference on Phosphorus Chemistry, 2016, тезисы докладов, Kazan, Russia. – P. 332.
9. Супрамолекулярные системы на основе нового пиrimидинсодержащего амфифилла макроциклической структуры / Д.А. Самаркина, Д.Р. Габдрахманов, В.Э. Семенов, А.С. Михайлов, Л.Я. Захарова // XXIII Всероссийская конференция «Структура и динамика молекулярных систем. Яльчик – 2016». Сборник тезисов докладов, 4–8 июля 2016 года. – С. 113.
10. Полимер-коллоидные комплексы на основе морфолиниевого ПАВ и полиакриловой кислоты при низкой степени ионизации / Э.А. Васильева, Д.А. Самаркина, С.С. Лукашенко, Е.П. Жильцова, Л.Я. Захарова // XX Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. В 5 т, Сборник тезисов, Екатеринбург, 26-30 сентября 2016 г. – С.216.
11. Супрамолекулярные системы на основе имидазолсодержащих амфифиллов: агрегация и взаимодействие с декамером ДНК / Д.А. Самаркина, Д.Р. Габдрахманов, С.С. Лукашенко, Л.Я. Захарова // VI Бакеевская Всероссийская с международным участием школа-конференция для молодых ученых «Макромолекулярные нанообъекты и полимерные нанокомпозиты», сборник тезисов докладов. Москва, 9-14 октября 2016 г. – С. 125.
12. Каталитические системы на основе катионных полимеризованных мицелл для расщепления эфиров кислот фосфора / Т.Н. Паширова, Д.А. Самаркина, Ф.Г. Валеева, П.А. Фетин, И.М. Зорин, А.Ю. Билибин, Л.Я. Захарова // VI Бакеевская Всероссийская с международным участием школа-конференция для молодых ученых «Макромолекулярные нанообъекты и полимерные нанокомпозиты», сборник тезисов докладов. Москва, 9-14 октября 2016 г. – С. 126.
13. Супрамолекулярные системы на основе катионного морфолинсодержащего ПАВ и полиакриловой кислоты / Д.А. Самаркина, Д.Р. Габдрахманов, С.С. Лукашенко, Л.Я. Захарова // IV Всероссийская научная конференция «Теоретические и экспериментальные исследования процессов синтеза, модификации и переработки полимеров», сборник тезисов докладов, Уфа, 26-29 октября 2016 г. – С. 183.

## Конференции

1. Устный доклад «Супрамолекулярные системы на основе амфифилла с пиридиновым фрагментом и триазольными головными группами» / Самаркина Д.А., Габдрахманов Д.Р., Семенов В.Э., Сайфина Л.Ф., Резник В.С., Захарова Л.Я. // Отчетная научная сессия Казанского национального исследовательского технологического университета за 2015 г., 3 февраля 2016 года.

2. Стендовый доклад «Супрамолекулярные системы на основе пиридинсодержащих амфифилов с пространственно загруженной головной группой». / Д.А. Самаркина, Д.Р. Габдрахманов, В.Э. Семенов, Л.Ф. Сайфина, В.С. Резник, Л.Я. Захарова // Итоговая научная конференция 2015 года академических институтов, подведомственных ФАНО России. Секция химическая (ИОФХ им. А.Е, Арбузова КазНЦ РАН), 10 февраля 2016 года.
3. Стендовый доклад «Супрамолекулярные системы на основе нового пиридинсодержащего амфифила макроциклической структуры» / Самаркина Д.А., Габдрахманов Д.Р., Семенов В.Э., Михайлов А.С., Захарова Л.Я. // XXIII Всероссийская конференция «Структура и динамика молекулярных систем. Яльчик – 2016», 4–8 июля 2016 года.
4. Стендовый доклад «Супрамолекулярные системы на основе имидазолсодержащих амфифилов: агрегация и взаимодействие с декамером ДНК» / Самаркина Д.А., Габдрахманов Д.Р., Лукашенко С.С., Захарова Л.Я. // VI Бакеевская Всероссийская с международным участием школа-конференция для молодых ученых «Макромолекулярные нанообъекты и полимерные нанокомпозиты», Москва, 9-14 октября 2016 г.
5. Стендовый доклад «Каталитические системы на основе катионных полимеризованных мицелл для расщепления эфиров кислот фосфора» / Самаркина Д.А., Паширова Т.Н., Валеева Ф.Г., Фетин П.А., Зорин И.М., Билибин А.Ю., Захарова Л.Я. // VI Бакеевская Всероссийская с международным участием школа-конференция для молодых ученых «Макромолекулярные нанообъекты и полимерные нанокомпозиты», Москва, 9-14 октября 2016 г.
6. Устный доклад «Супрамолекулярные системы на основе амфифилов с имидазолиевым фрагментом: самоорганизация в водных растворах и функциональная активность» / Самаркина Д.А., Габдрахманов Д.Р., Лукашенко С.С., Захарова Л.Я. // Отчетная научная сессия Казанского национального исследовательского технологического университета за 2016 г., 7 февраля 2017 года.
7. Устный доклад «Катионные амфифилы с имидазолиевым фрагментом: синтез, закономерности самоорганизации и биотехнологический потенциал» / Самаркина Д.А., Габдрахманов Д.Р., Лукашенко С.С., Захарова Л.Я. // Химическая секция Итоговой научной конференции за 2016 г. Казанского научного центра российской академии наук, 10 февраля 2017 года.

#### **Иные достижения аспиранта:**

1. Участие в гранте РФФИ № 15-03-05434 «Супрамолекулярные системы на основе полимеризующихся и комплексообразующих амфифилов:

- мультифакторный контроль самоорганизации и функциональной активности».
2. Участие в гранте РНФ № 14-23-00073 КНИТУ «Разработка новых методов синтеза би-, три- и тетрациклических соединений гетероциклического ряда, создание наноразмерных водорастворимых структур на их основе и перспективы биомедицинского использования».
  3. Участие в гранте РНФ №14-50-00014 ИОФХ «Формирование на базе Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН международного научно-инновационного Центра нейрохимии и фармакологии»
  4. Диплом за лучший стендовый доклад на VI Бакеевской Всероссийской (с международным участием) школе-конференции для молодых ученых «Макромолекулярные нанообъекты и полимерные нанокомпозиты».

Подпись аспиранта

Подпись научного руководителя