

Теоретической основой изучения термодинамики малых систем являются уравнение Кельвина и работы Гиббса. Впервые проведено прямое сопоставление результатов термодинамических построений с результатами, полученными современными методами статистической термодинамики, которую основал Гиббс.

В лекции дано изложение новых разработок в статистической термодинамике, которые ответили на самые важные вопросы по специфике малых систем – когда нельзя применять уравнения термодинамики.

Ограничения существуют по следующим признакам:

1) по размеру области, в которых важен учет флуктуаций, и, в частности, какие размеры элементарных объемов областей фигурируют в уравнениях термодинамики;

2) по степени однородности объема внутри фаз, и что такое минимальный размер фазы, или, чем фаза отличается от молекулярных ассоциатов;

3) по способу учета фактора кривизны искривленных границ раздела, включая вопрос о применимости уравнения Кельвина;

4) по степени неравновесных отклонений, описываемых уравнениями неравновесной термодинамики, и насколько эти отклонения малы, чтобы можно было считать реальным достижение равновесного состояния.

Также проанализированы понятие «пассивных сил» Гиббса и корректность применения термодинамических подходов в кинетике: использование коэффициента активности активированного комплекса.

SMALL SYSTEMS AND BASIS OF THERMODYNAMICS

Tovbin Yu. K.

Kurnakov Institute for General and Inorganic Chemistry, RAS, Moscow
Russian Federation State Scientific Center “Karpov Institute for Physical Chemistry” Moscow



РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ РАСЧЕТА ПОВЕДЕНИЯ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ В ЭМП

Титов С.В., Калмыков Ю.П., Казаринов К.Д.

ФирЭ им.В.А.Котельникова РАН, 141190, Фрязино, Московская обл., Россия,
pashkin1212@yandex.ru, kalmykov@univ-perp.fr, kazarinov@ms.ire.rssi.ru

Магнитные наночастицы нашли целый ряд применений в биомедицине, открывающих новые возможности для терапии и диагностики ряда тяжелых заболеваний. Главным преимуществом наночастиц является возможность применения неинвазивных методов и дальнего действия. Конкурентными преимуществами магнитных наночастиц, является то, что они могут быть визуализированы (при магнитной резонансной томографии), направлены и удержаны в определенном месте с помощью магнитного поля, нагреты в магнитном поле для инициации механизма выпуска лекарства или для осуществления гипертермии тканей.

Разработана методика расчета нелинейного стационарного отклика на воздействие переменным полем произвольной величины и ориентации системы *антиферромагнитных наночастиц*. Теория построена на использовании модели непрерывной диффузии Брауна. Определены зависимости площади петли динамического гистерезиса системы антиферромагнитных частиц от температуры системы, частоты, амплитуды и ориентации магнитного поля. Показано, что форма и площадь петли существенно меняются при наложении внешнего постоянного магнитного поля, что позволяет регулировать энергию, поглощаемую такими наночастицами [1].

В результате проведенных исследований получены аналитические формулы для *частот ферромагнитных резонансов* (ФМР) наночастиц с различными типами локальной магнитной анизотропии. Результаты согласуются с известными оценками, основанными на параболическом приближении локальных анизотропных потенциалов, но также позволяют вычислять частоты ФМР, когда параболическое приближение невозможно (потенциальный минимум обладает формой более высокого порядка). Продемонстрировано полное согласие полученных выражений с результатами строгого решения магнитного уравнения Ланжевена методом непрерывных матричных дробей[2]. Аналитические формулы для частот ФМР используются при оптимизации тепловых эффектов в системах магнитных наночастиц. Предложенные выражения также несомненно будут полезны для интерпретации экспериментальных данных выполняемых по данной тематике.

DEVELOPMENT OF METHODS OF CALCULATING THE BEHAVIOR OF MAGNETIC NANOPARTICLES IN EMF

Titov S.V., Kalmykov Yu.P., Kazarinov K.D.

Kotelnikov Institute of Radio Engineering and Electronics (Fryasino branch), RAS, Moscow reg., Russia

The nonlinear ac stationary response of antiferromagnetic nanoparticles subjected to both external ac and dc fields of arbitrary strength and orientation is investigated using Brown's continuous diffusion model. The nonlinear complex susceptibility and dynamic magnetic hysteresis (DMH) loops of an individual antiferromagnetic nanoparticle are evaluated and compared with the linear regime for extensive ranges of the anisotropy, the ac and dc magnetic fields,

damping, and the specific antiferromagnetic parameter. It is shown that the shape and area of the DMH loops of antiferromagnetic particles is substantially altered by applying a dc field that permits tuning of the specific magnetic power loss in the nanoparticles [1].

Analytical formulas for the ferromagnetic resonance (FMR) frequency of nanomagnets are obtained. The method is illustrated by determining the FMR frequency for nanomagnets with different kinds of anisotropy subjected to a uniform external field [2]. The results agree with exact numerical calculations from the magnetic Langevin equation obtained via matrix continued fractions. Analytical formulas for FMR frequencies are used in the optimization of thermal effects in systems of magnetic nanoparticles. The proposed expressions will also undoubtedly be useful for interpreting experimental data.

Литература

1. Kalmykov Yu. P., Ouari B., Titov S.V. Nonlinear stationary ac response and dynamic magnetic hysteresis of antiferromagnetic nanoparticles in superimposed ac and dc bias magnetic fields //J. Appl. Phys., 2016, V. 120, P. 053901
2. Титов С.В., Калмыков Ю.П., Казаринов К.Д., Влияние формы локальной магнитной анизотропии ферромагнитных наночастиц на частоту ферромагнитного резонанса //ФТТ, 2018, гот. к печати.



ИЗМЕНЕНИЕ АКТИВНОСТИ ГЕНОВ ПИГМЕНТНОГО ЭПИТЕЛИЯ СЕТЧАТКИ ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ СИНИМ СВЕТОМ

Фахранурова Л.И.

ФГБУН Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино, Россия

L.Fakhranurova@gmail.com

Существенную роль в патогенезе многих дистрофических процессов в сетчатке оказывает экспозиция солнечных лучей. В частности, как показывают многочисленные исследования в развитии такого заболевания как, возрастная макулярная дегенерация (ВМД). ВМД приводит к необратимому прогрессирующему поражению клеток в центральной фотоактивной зоны сетчатки и наиболее часто вызывает потерю зрения среди населения развитых стран мира. Наши данные говорят о том, что наибольший вред для клеток пигментного эпителия сетчатки наносит свет в синей части спектра. Пигментный эпителий выполняет огромное количество функций. Дисфункция или развивающиеся дистрофические процессы в пигментном эпителии в последствие могут привести к тяжелым результатам. В настоящей работе исследовалась транскрипционная активность генов, вовлеченных в метаболизм пигментного эпителия сетчатки, под действием облучения синим светом.

Наибольшие изменения транскрипционной активности исследуемых генов в клетках пигментного эпителия наблюдались после их облучения светом в течение 10 мин, особенно генов - маркеров окислительного стресса и генов-маркеров некроза. Так через час после облучения увеличивалась концентрация мРНК генов, вовлеченных в развитие окислительного стресса GPX2, CYBB, DUOX1, DUOX2, NOX5 и HMOX1. Также наблюдали увеличение экспрессии ген-маркеров некроза - FOXI1 и RAB25. Если посмотреть на динамику развития ответа на синий свет, то мы наблюдали снижение активности маркеров клеточной гибели, однако, маркеры окислительного стресса оказывались повышенными и на третьи сутки после облучения. Например, для генов GPX5, PTGS1 и APOE наблюдался постоянный повышенный уровень транскрипции. Интересно, что на 3 сутки происходило увеличение концентрации мРНК для большого количества генов, вовлеченных в развитие окислительного стресса, в частности для генов GPX2, GSTP1, DUOX2, PTGS1, APOE, MT3, SOD3, ALOX12, NOX4, UCP2, BNIP3, DHCR24, HSPA1A, SIRT2, HSP90AA1, POLRMT, TFAM.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и правительства Московской области в рамках научного проекта № 17-44-500740 и гранта Президента МК-1880.2017.7.

CHANGE OF ACTIVITY OF GENES OF RETINA PIGMENT EPITHELIUM OF THE AFTER IRRADIATION BY BLUE LIGHT

Fakhranurova LI

FGBUN Institute of Theoretical and Experimental Biophysics RAS, Pushchino, Russia L.Fakhranurova@gmail.com

AMD leads to irreversible progressive cell damage in the central retina zone and most often causes loss of vision among the population of the developed countries of the world. In the present work, the transcriptional activity of genes involved in the metabolism of retinal pigment epithelium under the influence of blue light irradiation was studied. The greatest changes in the transcriptional activity of the investigated genes in the cells of the pigment epithelium were observed after their irradiation with light for 10 min, especially the genes-markers of oxidative stress and genes-markers of necrosis. So an hour after irradiation, the concentration of mRNA of genes involved in the development of oxidative stress of GPX2, CYBB, DUOX1, DUOX2, NOX5 and HMOX1 increased. An increase in the expression of the gene-markers of necrosis - FOXI1 and RAB25 - was also observed. If we look at the dynamics of the response to blue light, we observed a decrease in the activity of the cell death markers, however, the markers of oxidative stress appeared to be elevated on the third day after irradiation. For example, for the genes GPX5, PTGS1 and APOE, a constant elevated level of transcription was observed. Interestingly, on the 3rd day, the mRNA concentration increased for a large number of genes involved in the development of oxidative stress, in particular for the genes GPX2, GSTP1, DUOX2, PTGS1, APOE, MT3, SOD3, ALOX12, NOX4, UCP2, BNIP3, DHCR24, HSPA1A, SIRT2, HSP90AA1, POLRMT, TFAM.