

ХАРАКТЕРИСТИКА ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ МЕЖДУ АНОДНЫМ МИКРОБИОЛОГИЧЕСКИМ КОНСОРЦИУМОМ И АНОДОМ КАК КЛЮЧЕВЫХ ФАКТОРОВ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ МИКРОБНОГО ТОПЛИВНОГО ЭЛЕМЕНТА

Жигула Е.А., Петухов В.И., Жигула Л.Д.

Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия
(Приморский край, г. Владивосток, ул. Суханова, 8), e-mail: ktwalker17@gmail.com

Предлагается характеристика основных процессов переноса электронов от микробной биопленки к аноду, а также факторов, влияющих на эти процессы. На сегодняшний день существует три основных способа переноса электронов: посредством окислительно-восстановительного мобильного медиатора-шаттла, через проводящие и посредством особого мембранносвязанного комплекса. В статье представлена характеристика каждого способа, а также обзор ведущихся на сегодняшний день исследований в данной области. Авторы анализируют проблему использования различных способов электронного переноса для разных слоев толщи анодной биопленки и выделяют наиболее перспективные направления для исследования области электрохимического взаимодействия микробиологического консорциума с анодом. Представлен краткий обзор исследований в области выведения такого бактериального штамма, который позволит МТЭ вырабатывать больше электроэнергии без добавления новых дорогостоящих катализаторов или электронных шаттлов.

CHARACTERISTICS OF ELECTRON TRANSFER PROCESSES BETWEEN THE ANODE AND THE ANODE MICROBIAL CONSORTIUM AS A KEY FACTOR IN THE PERFORMANCE OF MICROBIAL FUEL CELL

Zhigula E.A., Petukhov V.I., Zhigula L.D.

Far Eastern Federal University, Vladivostok, Russia (Primorsky region, Vladivostok, Sukhanova st, 8),
e-mail: ktwalker17@gmail.com

The following article characterizes the main processes of electron transfer from the anode associated biofilm to the anode and factors that might influence these processes. At the present day three main pathways for electron transfer have been identified and include: direct membrane bound complex mediated electron transfer, mobile redox shuttle mediated electron transfer and electron transfer through conductive pili, so called nanowires. The work includes the characteristics of every pathway and the brief review of the recent research in this sphere. Authors characterize the problem of using different ways of electron transfer for different layers of the anode associated biofilm and define the highlight for the perspectives of the future research of the electrochemical interactions between microbial consortium and the anode. The article also provides the brief review of the research in the sphere of producing a strain that would let the MFC produce more electricity without addition of high cost catalysts or mediating shuttles.

ВОДОРОДСОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ TiFe С НАНЕСЕННЫМ ЗАЩИТНЫМ ПОЛИМЕРНЫМ ПОКРЫТИЕМ

**Задорожный М.Ю.¹, Стругова Д.В.¹, Геодакян К.В.², Олифиров Л.К.¹,
Миловзоров Г.С.¹, Задорожный В.Ю.¹**

¹ Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Россия, Москва
² МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

Методом механоактивационной обработки в высокоэнергетическом шаровом планетарном активаторе нанесено покрытие из барьерного полимера политетрафторэтилена (ПТФЭ) на порошок механосинтезированного нанокристаллического гидридообразующего интерметаллического соединения TiFe. Полученные металлополимерные композиты, на основе интерметаллического соединения TiFe, изучены методом сканирующей электронной микроскопии, проведены прецизионные р-V-T измерения при их взаимодействии с водородом. В работе установлены: емкостные характеристики полученных металлополимерных композитов (по количеству абсорбируемого и десорбируемого водорода) и режим активации взаимодействия с водородом изготовленного композита на основе TiFe, покрытого защитным слоем из ПТФЭ. Показана возможность использования ПТФЭ в качестве защитного, проницаемого для водорода, покрытия, способного предотвращать окисление активной поверхности металла, а также выдерживать процедуру активации взаимодействия с водородом, проведение которой необходимо для оптимальной работы интерметаллического соединения TiFe.

HYDROGEN SORPTION PROPERTIES OF INTERMETALLIC COMPOUNDS TiFe COATED BY PROTECTIVE COATING

Zadorozhnyy M.Y.¹, Strugova D.V.¹, Geodakyan K.V.², Olifirov L.K.¹, Milovzorov G.S.¹, Zadorozhnyy V.Y.¹

¹ National University of Science and Technology (MISIS) Russia, Moscow,
² Faculty of Chemistry, Moscow State University, Moscow, 119992 Russia

The method of mechanical alloying in a planetary ball mill was used for the deposition of the polytetrafluoroethylene (PTFE) coating on the powder of TiFe intermetallic compound, using for hydrogen storage application. The prepared

metal-polymer composites were studied by the method of electron microscopy and were analyze their interaction with hydrogen. In the present work was determined the hydrogen storage capacity of the obtained metal-polymer powder TiFe coated with PTFE. Was shown the possibility of using the PTFE as hydrogen -permeable protective coating, which is good for the preventing oxidation of the active metal surface and capable of resist the activation process for the interaction with hydrogen.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОСТИ ПЕНИЦИЛЛИНАМИДАЗЫ МЕТОДОМ ВОЗМУЩЕНИЯ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ

Зейфман А.А.¹, Перепёлкин В.В.², Новиков Ф.Н.¹, Строганов О.В.¹, Чиллов Г.Г.¹

1 ООО «Молекулярные Технологии», Москва, Россия (119992, ул. Ленинские Горы, д. 1, стр.75А)

2 Химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия
(119991, ГСП-1, Ленинские Горы, д. 1, стр.3)

Предложен новый подход к моделированию стереоселективности ферментативных реакций, основанный на применении метода возмущения свободной энергии в молекулярно-динамических расчётах. Для определения соотношения скоростей превращения энантиомеров рассчитывается разница между свободными энергиями комплексов белок-субстрат для разных энантиомеров, а также разница между свободными энергиями переходных состояний, на основании чего определяется итоговое различие в свободных энергиях активации реакций. Энергетическое различие хиральных состояний определяется, в свою очередь, путём постепенного перевода хирального атома каждого из энантиомеров в плоское ахиральное состояние, идентичное для обоих энантиомеров. Разработанный подход позволяет явным образом учитывать все атомы белка и лиганда, а также молекулы растворителя, и, путём усреднения по набору термодинамических состояний системы, приводит к истинному значению разницы свободной энергии активации реакции для двух энантиомеров субстрата. Проведённая валидация метода по известным экспериментальным данным показала его способность не только качественно, но и количественно предсказывать энантиоселективность гидролиза хирального субстрата пенициллинамидазы 2-фенил-N-(1-фенетил)ацетамида. В сочетании с существующими методами моделирования структур мутантных форм фермента предложенный метод расчёта стереоселективности позволит проводить направленный дизайн новых эффективных биокатализаторов.

MODELING OF PENICILLINAMIDASE ENANTIOSELECTIVITY BY FREE ENERGY PERTURBATION

Zeifman A.A.¹, Perepelkin V.V.², Novikov F.N.¹, Stroganov O.V.¹, Chilov G.G.¹

1 LLC Molecular Technologies, Moscow, Russia (119992, Leninskie Gory 1, bldg. 75A)

2 Chemistry Department, Moscow State University, Moscow, Russia (119991, Leninskie Gory 1, bldg. 3)

New free energy perturbation/molecular dynamics method for the calculation of enzymatic reactions enantioselectivity was proposed. Ratio of rate constants for two enantiomers is obtained by calculating free energy difference between initial enzyme-substrate complexes of both enantiomers and reaction transition states for both enantiomers, which together gives the difference in the activation energy. Free energy transition between enantiomers is achieved by planarizing the chiral carbon atoms. Proposed approach allows to account for all protein, solvent and ligand atoms and produces true free energy value due to averaging over the thermodynamic ensemble of states. It allowed not only to predict the direction of the enantioselectivity but gave numerical data which was in a good agreement with known experimental results for the hydrolysis of the chiral substrate by penicillinamidase - 2-phenyl-N-(1-phenethyl) acetamide. In conjunction with existing methods for modeling of mutant enzyme structures, proposed approach will allow for a straightforward design of novel efficient biocatalyzers.

КИНЕТИКА ПРОЦЕССА СИНТЕЗА НАНОРАЗМЕРНОГО ДИСУЛЬФИДА ВОЛЬФРАМА В УСЛОВИЯХ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА

Иртегов Ю.А., Ажгихин М.И., Коробочкин В.В.

ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»,
Томск, Россия (634050, Томск, пр. Ленина, 30), e-mail:irtegovu@gmail.com

Исследована зависимость скорости горения нанопорошка вольфрама с серой и степени превращения в волне горения от давления аргона, а также от избытка серы в шихте при постоянном давлении синтеза. Представлены фотографии процесса горения стехиометрической смеси металла с серой, на основании которых была определена скорость горения образцов. Исследовано влияние избытка серы в шихте (от 0 до 20 % мас.) на максимальную температуру горения. Установлено, что при давлении 3 МПа увеличение избытка серы в шихте снижает скорость горения нанопорошка вольфрама с серой с 0,27 до 0,12 см/с. Установлено, что зависимость скорости горения от расчетной степени превращения наноразмерного порошка вольфрама и серы соответствует параболическому закону окисления. Значение энергии активации процесса взаимодействия нанопорошка вольфрама с серой в режиме высокотемпературного самораспространяющегося синтеза составляет 90,1 кДж/моль, что указывает на одновременное лимитирование скорости процесса за счет химической реакции и диффузии серы.