

Форма № 21

УТВЕРЖДАЮ

Вице-директор ОИЯИ

«_____» _____ 20 г.

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ НА ОТКРЫТИЕ ТЕМЫ
для включения
В ПРОБЛЕМНО-ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ОИЯИ НА 2018-2020 гг.**

Шифр темы
04-4-11...-2018/2020

Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка
Сектор Рамановской спектроскопии

Направление: 04 – Физика конденсированных сред, радиационные и радиобиологические исследования

Наименование темы: Современные тенденции и разработки в области Рамановской микроспектроскопии и фотолюминесценции для исследований конденсированных сред.

Руководители темы: Г.М. Арзуманян, Н. Кучерка

Краткая аннотация:

Работы, реализованные в рамках предшествующей темы № 04-4-1111-2013/2017, продемонстрировали актуальность данной тематики и, что не менее важно, стабильную работу многомодальной оптической платформы на базе микроспектрометра «КАРС». Отметим, что проведенная в 2015-2016гг. модернизация оптической платформы позволила вывести данный инструментарий в число современных, востребованных и уникальных Рамановских микроспектрометров, аналогов которому по своим функциональным характеристикам и возможностям в России и в странах СНГ сегодня нет. Микроспектрометр «КАРС» также вполне конкурентоспособный на мировом уровне в своем классе аналитических инструментов.

Эти факторы легли в основу предложения по открытию новой темы, нацеленной на развитие и реализацию современных способов ультрачувствительной, селективной регистрации одиночных/единиц молекул методами нелинейной лазерной микроспектроскопии комбинационного (рамановского) рассеяния света. В первую очередь, речь идет о спектроскопии когерентного антистоксова рассеяния света (КАРС) органических молекул-аналитов, локализованных на наноструктурированных поверхностях, обеспечивающих гигантское комбинационное рассеяние (ГКР) этими молекулами, с применением ультракоротких (пикосекундных) импульсов лазерного излучения. Это явление известно как гигантское когерентное антистоксово рассеяния света – ГКАРС или SECARS (Surface Enhanced CARS) в англоязычной терминологии. Отметим, что во всем мире в этой области опубликовано к настоящему времени всего около 20 оригинальных работ.

Первые постановочные эксперименты для реализации этой непростой и ультрачувствительной методики были успешно проведены в 2017 году в Секторе Рамановской спектроскопии ЛНФ. Однако, для ее полномасштабной, стабильной и воспроизводимой реализации, необходимо провести комплексную экспериментально-техническую работу. Особое внимание будет уделено также и теоретическому сопровождению экспериментальных исследований, включая моделирование нелинейных процессов взаимодействия пикосекундных импульсов с молекулами, адсорбированными на наноструктурированных (ГКР-активных) подложках.

Другой современной составляющей темы является исследование фото- и апконверсионной люминесценции на основе перспективных люминофорных наноструктур типа «ядро-оболочка». Эти структуры известны своей полифункциональностью, разнообразием своего химического состава и стабильностью, что, с недавнего времени, позволило их успешно применять во многих прикладных задачах, связанных с оптикой, биомедициной, экологией и др. После изучения спектрально-структурных характеристик подобных люминофоров, на завершающем этапе темы намечено протестировать наноструктуру «ядро-оболочка» в фотодинамической терапии рака. В качестве «ядра» будут использоваться одни из наиболее эффективных на апконверсионную люминесценцию нанокристаллы $\text{NaYF}_4:\text{Yb}^{3+}, \text{Tm}^{3+}/\text{Er}^{3+}$, а в качестве «оболочки» сравнительно новый класс катионных порфиринов с высоким квантовым выходом реактивных форм кислорода, в т.ч. синглетного кислорода.

Также намечено создание единой и комплементарной оптической платформы для спектрально-селективной визуализации/биовизуализации исследуемых образцов методами нелинейной рамановской микроскопии и апконверсионной люминесценции.

Таким образом, предлагаемая тема находится в русле мировых тенденций развития нелинейных методов рамановской спектроскопии, нацеленных, в том числе, на спектроскопию одиночных молекул, а также и фото- и апконверсионной люминесценции на наноструктурах «ядро – оболочка», и, тем самым, обуславливает современный и инновационный характер предлагаемой темы.

Работы по теме в целом будут выполняться коллективом сектора Рамановской спектроскопии ЛНФ, состоящего из двух групп, в тесном сотрудничестве с рядом заинтересованных партнеров из различных научно-образовательных учреждений и организаций, в первую очередь, из стран-участниц ОИЯИ.

Проект по теме:

Ультрачувствительная микроспектроскопия SECARS и люминесцентные наноструктуры «ядро-оболочка»

Руководители проекта: Г.М. Арзуманян, Н. Кучерка

Зам. руководителя проекта: К.З. Маматкулов

Основные этапы темы:

1. Разработка научно-технических требований по модификации микроспектрометра «КАРС» под ультрачувствительную модальность ГКАРС (SECARS).
2. Изучение спектральных и плазмонных характеристик ГКР-активных подложек на основе серебряных и золотых наночастиц с различной конфигурацией.
3. Исследования природы нерезонансной составляющей ГКАРС сигналов с молекул-аналитов, локализованных на наноструктурированных подложках.

4. Систематические эксперименты по спектроскопии ГКАРС и картированию интенсивности ГКАРС с пикосекундным возбуждением.
5. Измерения и регистрация предельно низких концентраций органических молекул методом ГКАРС – налаживание методики микроспектроскопии одиночных молекул.
6. Теоретическая поддержка нелинейных процессов взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с молекулами-аналитами и ГКР-активными подложками.
7. Изучение спектрально-структурных характеристик апконверсионных люминофоров на основе наноструктур типа «ядро-оболочка».
8. Разработка концепции единой оптической платформы для контрастной биовизуализации образцов методами нелинейной рамановской микроскопии и апконверсионной люминесценции.
9. Тестовое применение люминесцентных наноструктур «ядро-оболочка» в биомедицине, в частности, в фотодинамической терапии рака.
10. Верификация опухолевых и стволовых клеток методом спектроскопии комбинационного рассеяния.
11. Расширение программы функционирования микроскопа «КАРС» как «дружественного прибора пользователя».

Ожидаемые результаты по завершению этапов темы:

1. Модернизированная под ультрачувствительную спектроскопию ГКАРС многомодальная оптическая платформа.
2. Выбор наиболее оптимальных по своим спектральным и плазмонным характеристикам ГКР-активных подложек для поверхностно-усиленного КАРС-процесса.
3. Достижение уровня воспроизводимой регистрации спектров рамановского рассеяния одиночных/единиц органических молекул методами ГКР и ГКАРС.
4. Разработка теоретической модели нелинейного взаимодействия пикосекундных импульсов с молекулами-аналитами, адсорбированными на ГКР-активных подложках.
5. Изучение спектрально-структурных характеристик апконверсионных люминофоров с различными редкоземельными элементами на основе наноструктур «ядро-оболочка».
6. Создание единой платформы для комплементарной спектрально-селективной визуализации биообразцов методами нелинейной рамановской микроскопии и апконверсионной люминесценции.
7. Тестовые эксперименты по выявлению эффективности применения катионных/металло-порфиринов в качестве оболочек, и нанокристаллов $\text{NaYF}_4:\text{Yb}^{3+}, \text{Tm}^{3+}/\text{Er}^{3+}$ в качестве ядра, в фотодинамической терапии рака.
8. Получение данных о сходствах и различиях спектров рамановского рассеяния опухолевых клеток мозга крысы/мышы и мезенхимальных стволовых клеток (неопухолевые клетки) и, на их основе, выработка рекомендаций по прогнозированию степени злокачественности опухолевых клеток.

Список участников и организаций

Страна или международная организация	Город	Институт или лаборатория	Участники	Статус
Армения	Ереван	Институт биохимии НАН РА	Гюльхандянян Г.В. + 3 чел.	Договор Совместные работы Обмен визитами
Белоруссия	Минск	Институт физиологии НАН РБ	Кульчицкий В.А. + 3 чел.	Договор Совместные работы Обмен визитами
Белоруссия	Минск	БГУИР	Бондаренко А.В. + 2 чел.	Совместные работы Обмен визитами
Белоруссия	Минск	ООО «СОЛ инструментс»	Копачевский В.Дж. + 2 чел.	Совместные работы Обмен визитами
Болгария	София	Институт микробиологии БАН	Данова С. + 2 чел	Протокол Обмен визитами
Великобритания	Букингем	Букингемский центр астробиологии	Гувер Р.	Совместные работы Обмен визитами
Германия	Юлих	Институт сложных систем-б, Исследовательский Центр Юлих	Вильболд Д. + 3 чел.	Совместные работы Обмен визитами
Латвия	Рига	Институт физики твердого тела	Шараковский А.	Протокол
Польша	Вроцлав	Вроцлавский университет	Филаровски А. + 1 чел.	Совместные работы Обмен визитами
Польша	Познань	Университет им. Адама Мицкевича	Яздвезска М.	Совместные работы Обмен визитами
Россия	Москва	ИОФ РАН	Фабелинский В.И. + 5 чел.	Протокол Совместные работы
Россия	Москва	МГУ	Куручкин И.Н. + 2 чел.	Совместные работы Обмен визитами
Словакия	Кошице	Университет им. П.И. Шафарика	Грубовчак П. + 1 чел.	Протокол Обмен визитами
Украина	Донецк	Донецкий национальный университет	Пойманова Е.Ю.	Совместные работы Обмен визитами

Сроки выполнения темы: январь 2018 – декабрь 2020

Полная сметная стоимость темы

«Современные тенденции и разработки в области Рамановской микроспектроскопии и фотолюминесценции для исследований конденсированных сред» на 2018-2020 гг.

NN ПП	Наименование статей бюджета	ВСЕГО	
		2018-2020 гг.	в т.ч. 2018 г.
1	Заработная плата	221,8	67,0
2	Страховые выплаты	67,0	20,2
3	Соцбытфонд	14,5	4,4
4	Расходы по международному сотрудничеству:	54,0	18,0
	а) командировки в страны-участницы	24,0	8,0
	б) командировки в страны-неучастницы	15,0	5,0
	в) командировки на территории России	9,0	3,0
	г) прием иноспециалистов	6,0	2,0
5	Материалы	38,0	13,0
6	Оборудование	62,0	20,0
10	Оплата услуг научно-исследовательских организаций	26,0	8,0
15	Оплата услуг связи	6,6	2,2
	ИТОГО:	489,9	152,8
	Административно-хозяйственные расходы	143,3	43,3
	ВСЕГО:	633,2	196,1

Другие источники финансирования: Гранты ПП стран-участниц ОИЯИ ~ (10-12) к\$ в год

СОГЛАСОВАНО:

Главный ученый секретарь ОИЯИ

“ ___ ” _____ 2017 г.

**Начальник
Планово-финансового отдела**

“ ___ ” _____ 2017 г.

**Начальник
Научно-организационного отдела**

“ ___ ” _____ 2017 г.

Директор ЛНФ

“ ___ ” _____ 2017 г.

Ученый секретарь ЛНФ

“ ___ ” _____ 2017 г.

Экономист ЛНФ

“ ___ ” _____ 2017 г.

Руководители темы

“ ___ ” _____ 2017 г.

“ ___ ” _____ 2017 г.