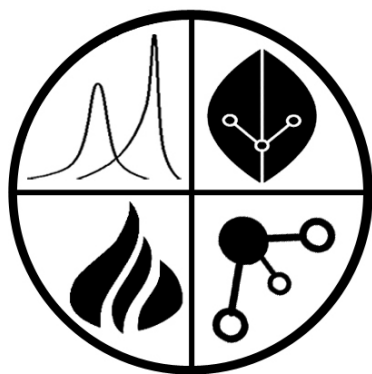


РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
ОТДЕЛЕНИЕ ХИМИИ И НАУК О МАТЕРИАЛАХ  
РОССИЙСКИЙ ФОНД ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ  
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ РАН

# **УСПЕХИ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

Сборник тезисов докладов на  
Всероссийской молодежной конференции



ЧЕРНОГОЛОВКА  
21 – 23 июня 2011 года

УДК 53; 54; 57; 66;  
ББК 22; 24; 28;  
У 78

*Редакционная коллегия:* академик С.М. Алдошин, В.Б. Минцев, С.А. Курочкин, А.В. Левченко, Е.А. Салганский, Г.В. Малков, М.В. Цветков

**У 78    Успехи химической физики:** Сб. тезисов докладов на Всероссийской молодежной конференции, 21-23 июня 2011г. – Черноголовка, ИПХФ РАН, 2004. – 264с.

В сборнике тезисов представлены материалы Всероссийской молодежной конференции «Успехи химической физики», проводимой в рамках юбилейных мероприятий, посвященных 55-летию основания Научного центра в Черноголовке и 20-летию Института проблем химической физики РАН, по направлениям: общие проблемы химической физики; строение вещества и структура твердых тел; кинетика и механизм сложных химических реакций; катализ; состояние вещества в экстремальных условиях; химическая физика процессов горения и взрыва, процессов образования и модификации полимеров, биологических процессов и систем, супрамолекулярных и наноразмерных систем; научные основы создания новых материалов и наноматериалов с заданными свойствами и функциями, новых химико-технологических процессов; новые и возобновляемые источники энергии; альтернативная энергетика.

Конференция проводится при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, № 11-03-06016

**УДК 53; 54; 57; 66;  
ББК 22; 24; 28;**

ISBN 978-5-91845-013-0

© Учреждение Российской академии наук  
Институт проблем химической физики РАН, 2011

# Оглавление

## УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ 27

*Бабочкин К.А., Савченко А.В., Смирнов Г.Н., Терновой В.Я., Туртиков В.И., Уткин А.В., Шестов Л.М., Шилкин Н.С., Юрьев Д.С., Якушев В.В., Шарков Б.Ю., Фортвов В.Е., Колесников С.А., Голубев А.А., Дудин С.В., Канцырев А.В., Лавров В.В., Минцев В.Б., Николаев Д.Н.*

Применение протонной радиографии на ускорителе ИТЭФ-ТВН в исследованиях ударно-волновых и детонационных процессов 28

*Блинкова С.В., Береговая И.В., Щеголева Л.Н., Багрянский В.А.*

Изучение внутримолекулярной динамики анион-радикалов трифторбензолов методом оптически детектируемого ЭПР 29

*Вагапова Г.И., Валеева Ф.Г., Ибрагимова А.Р., Гайнанова Г.А., Захарова Л.Я., Сякаев В.В., Галкина И.В., Тудрий Е.В., Ризванов И.Х., Романов А.О.*

Агрегационные свойства и каталитическая активность алкилтрифенилфосфоний бромидов 30

*Гадомский С.Я., Варламов В.Т.*

Изучение кинетики цепных обратимых реакций в системе хинонимин + гидрохинон, протекающих с длительными периодами нестационарности 31

*Дементьев П.С.*

Изотопически селективная лазерная диссоциация 2-хлорэтилтрифторсилана 32

- Заславский Г.Е., Манелис Г.Б.*  
Теоретическое обоснование оптимальных управляющих параметров процесса фильтрационного горения в присутствии металлов 33
- Кашапова Э.Р., Майер Г.В., Артюхов В.Я.*  
Особенности электронной структуры и спектрально-люминесцентных свойств в индокарбоцианине и его циклических и ангулярных бис-хромофорах 34
- Комарова Н.С., Кривенко А.Г.*  
Электрохимическое модифицирование одностенных углеродных нанотрубок в различных растворителях 35
- Коплак О.В., Дмитриев А.И., Моргунов Р.Б.*  
Функциональные нано- и гетероструктуры магнитных полупроводников как основа MRAM и Spin-LED 36
- Кузнецов М.А., Сергеев М.О., Антонов А.Ю., Ревина А.А., Боева О.А.*  
Каталитические свойства наночастиц рутения, полученных в обратноцеллярных растворах 37
- Курочкин С.А., Мазонина Л.И., Перепелицина Е.О., Грачев В.П.*  
«Живая» трехмерная радикальная полимеризация как способ получения высокоразветвленных полимеров 38
- Луценко Н.А.*  
О математической модели движения газа в пористых средах с очагами гетерогенного горения 39
- Лыго О.Н., Тимохина Е.Н., Некипелова Т.Д.*  
Необычная зависимость фотофизических и фотохимических свойств 8-нитроб-этокси-2,2,4-триметил-1,2-дигидрохинолина от длины волны возбуждения 40
- Магомедов Р.Н., Прошина А.Ю.*  
Селективный оксикрекинг тяжелых компонентов попутного газа 41
- Майоров А.В., Крисяк Б.Э., Попов А.А.*  
Описание различными квантово-химическими метода-

- ми первичной стадии озонолиза этилена и тетрафтор-  
этилена 42
- Насонов П.А., Ширинкина И.Г., Петрова А.Н., Бродова И.Г., Шорохов Е.В.*  
Структурные превращения в алюминиевом сплаве В95  
в условиях динамической деформации 43
- Некрасова Я.А., Никоноров Н.В., Асеев В.А., Колобкова Е.В.*  
Люминесцентные свойства иттербий-эрбиевой наноструктурированной стеклокерамики при низкой температуре 44
- Пискарев М.С., Яблоков М.Ю., Гильман А.Б., Кузнецов А.А.*  
Модифицирование поверхности пленки ПТФЭ в тлеющем разряде постоянного тока 45
- Поздняков И.П., Плюснин В.Ф., Глебов Е.М., Гривин В.П., Мельников А.А., Компанец В.О., Чекалин С.В.*  
Первичные процессы в фотохимии Fe(III)-карбоксилатных комплексов в водных растворах 46
- Полетаева Д.А., Корнев А.Б., Файнгольд И.И., Хакина Е.А., Смолина А.В., Рыбкин А.Ю., Котельникова Р.А., Богданов Г.Н., Трошин А.П., Котельников А.И.*  
Мембранотропные свойства полизамещенных водорастворимых производных фуллеренов 47
- Польщиков С.В., Недорезова П.М., Клямкина А.Н., Аладышев А.М., Щеголихин А.Н., Шевченко В.Г., Крашенинников В.Г., Монахова Т.В., Мурадян В.Е.*  
Многофункциональные композиционные материалы на основе ПП и наноразмерных углеродных наполнителей. Получение методом полимеризации *in situ* и свойства 48
- Приемченко К.Ю., Гуренцов Е.В.*  
Синтез наночастиц методом УФ лазерного фотолиза пентакарбонила железа 49
- Салганский Е.А., Глазов С.В., Кислов В.М., Салганская М.В.*  
Сложная структура волны фильтрационного горения твердого топлива 50

- Сафаров Ф.Э., Казаков Д.В.*  
Хемилиуминесценция комплексов лантаноидов в реакциях с органическими пероксидами 51
- Сафронов Н.Е., Долгобородов А.Ю., Махов М.Н., Стрелецкий А.Н.*  
О возможности детонации смесей на основе нанокремния 52
- Сухинина Н.С., Масалов В.М.*  
Синтез коллоидных наночастиц диоксида кремния методом гидролиза тетраэтоксисилана в присутствии L-аргинина 53
- Тарасевич Д.В., Бондарев В.Н.*  
Статистическая термодинамика «классических» кристаллов и проблема их устойчивости 54
- Файнгольд Е.Е., Бравая Н.М., Петрова Л.А., Махаев В.Д., Гагиева С.Ч., Тускаев В.А., Бульчев Б.М.*  
Активация феноксииминных катализаторов титана и циркония метилалюмоксанами с разным содержанием триметилалюминия в отсутствие мономера и реакциях каталитического превращения гексена-1 55
- Файнгольд И.И., Котельникова Р.А., Коновалова Н.П., Мищенко Д.В., Фрог Е.С., Полетаева Д.А., Богданов Г.Н., Котельников А.И., Романова В.С.*  
Угбридные структуры на основе фуллерена C<sub>60</sub> в биологических системах и экспериментальной химиотерапии 56
- Хатмуллина К.Г., Ярмоленко О.В., Батурина А.А., Грачев В.П., Ефимов О.Н.*  
Электролиты на основе сверхразветвленного полимера для электрохромных устройств 57
- Юданов В.В., Иванов А.И., Михайлова В.А.*  
Кинетика сверхбыстрой фотоиндуцированной рекомбинации зарядов в донорноакцепторных комплексах в полярных растворителях 58

<i>Яцкевич Е.И., Миргородская А.Б., Захарова Л.Я.</i> Супрамолекулярные системы геминальное ПАВ - водо- растворимый неионный полимер	59
<b>СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ</b>	<b>61</b>
<b>ОБЩИЕ ПРОБЛЕМЫ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ</b>	<b>61</b>
<i>Баскаков С.А., Шульга Ю.М., Кабачков Е.Н., Смир- нов В.А., Мартыненко В.М., Мурадян В.Е., Баскако- ва Ю.В., Кресова Е.И.</i> Взаимодействие оксида графена с основными красите- лями	62
<i>Гареев Б.М., Абдрахманов А.М., Шарипов Г.Л.</i> Однопузырьковая сонолюминесценция в водных рас- творях галоидных солей	63
<i>Дорофеенко С.О.</i> Опыт моделирования течения сыпучих сред методом дискретных элементов с помощью открытых программ- ных платформ YADE и PARAVIEW.	64
<i>Лещинская К.В., Рошан Н.Р., Чистов Е.М.</i> Получение высокочистого водорода из коксового газа с использованием мембран из сплава PdInRu	65
<i>Ляпкосова О.С., Лебедев Н.Г.</i> Влияние калибровочных деформационных полей гра- феновых лент на эволюцию предельно короткого элек- тромагнитного импульса	66
<i>Мамин Э.А., Крисюк Б.Э., Майоров А.В., Попов А.А.</i> Влияние заместителя при двойной связи и ее деформа- ции на реакцию озона с этиленом	67
<i>Манжос Р.А., Кривенко А.Г., Сафонов В.А., Чоба М.А.</i> Адсорбция кислорода на золоте в растворе поверхност- но неактивного электролита	68
<i>Мухамадиева С.Р., Итуллина А.Н., Масагутова Г.А.</i> Хемилюминесценция при твердофазном взаимодействии солей уранила с дифторидом ксенона	69

- Силкин С.В., Хлюстова А.В., Максимов А.И.*  
Приэлектродные процессы в подводном разряде типа  
торцевого 70
- ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ И  
ВЗРЫВА. СОСТОЯНИЕ ВЕЩЕСТВА В ЭКСТРЕ-  
МАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ** 71
- Ананьева М.В., Кригер В.Г., Каленский А.В., Гришае-  
ва Е.А., Боровикова А.П.*  
Природа взрывного разложения азидов тяжелых метал-  
лов 72
- Берестов А.С., Гудкова И.Ю.*  
Исследование физико-химических процессов при филь-  
трационном горении металлургических шламов, содер-  
жащих железо и цинк 73
- Бодрова А.В., Алешин В.В., Михайлов Ю.М.*  
Низкотемпературное превращение балластированного  
циклотриметилентринитрамина (RDX) в таблетирован-  
ном виде 74
- Гришаева Е.А., Кригер В.Г., Каленский А.В., Звекон А.А.,  
Ананьева М.В.*  
Зависимость длительности индукционного периода взры-  
ва азида серебра от начальной температуры образца 75
- Дорофеенко Е.М., Лемперт Д.Б.*  
Поиск закономерностей между элементарным составом  
твердого ракетного топлива, его теплосодержанием, ве-  
личиной удельного импульса и температурой горения 76
- Егоров Е.С.*  
Исследование изменения валентного состояния железа  
в импактных процессах 77
- Зяблицкий С.А., Певченко Б.В., Суханов Г.Т., Панчен-  
ко Н.Ф., Алексеева Н.А.*  
Исследование влияния нового энергоемкого пластифици-  
катора нитротриазолового ряда на физико-химическую  
стабильность азолового связующего 78



- Капинос С.П., Шафеев Р.В., Дунаев А.В., Пивоваренко С.А.*  
Кинетика плазмохимического взаимодействия GaAs с HCl и смесями HCl / Ar 79
- Колесников С.А., Бабочкин К.А., Голубев А.А., Дудин С.В., Канцирев А.В., Лавров В.В., Минцев В.Б., Савченко А.В., Смирнов Г.Н., Шестов Л.М., Туртиков В.И., Уткин А.В.*  
Исследование структуры детонационных волн в эмульсионных взрывчатых веществах методом протонной радиографии 80
- Колесникова Ю.Ю., Кислов В.М., Салганский Е.А.*  
Влияние теплопотерь на характеристики фильтрационного горения углерода 81
- Кудакина В.А., Якушев В.В., Жуков А.Н., Рогачёва А.И.*  
Получение фазы высокого давления нитрида кремния методом высокотемпературного ударного сжатия 82
- Михайлова З.А., Лемперт Д.Б.*  
Термодинамическое исследование основных отличий ракетных топлив с алюминием или цирконием и органическим окислителем, содержащим кислород и фтор 83
- Никитин А.П., Кригер В.Г., Каленский А.В., Звекон А.А., Зыков И.Ю.*  
Разогрев включений в инертной среде лазерным импульсом 84
- Семенова О.А., Ефремов А.М., Светцов В.И.*  
Кинетические и транспортные характеристики процессов под действием электронного удара в плазме  $\text{CH}_4$  85
- Хорев М.С., Максимов А.И., Хлюстова А.В.*  
Нанесение тонких пленок на диэлектрическую подложку посредством тлеющего разряда атмосферного давления с электролитным катодом 86
- Шмельков Ю.Б., Самуйлов Е.В.*  
Моделирование состава и теплофизических свойств продуктов сгорания различных видов топлив с учетом фазовых и химических превращений 87

- Юдина А.В., Ефремов А.М., Светцов В.И.*  
 Электрофизические параметры плазмы тлеющего разряда постоянного тока в смеси HCl/H<sub>2</sub> 88
- Якушев В.В., Уткин А.В., Жуков А.Н.*  
 Ударная сжимаемость пористых образцов из нитрида кремния 89
- КИНЕТИКА И МЕХАНИЗМ СЛОЖНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ. КАТАЛИЗ** 91
- Алферов К.А., Чуканова О.М., Белов Г.П.*  
 Чередующиеся сополимеры СО с олефинами. синтез и свойства 92
- Гадомская А.В., Варламов В.Т.*  
 Кинетика цепной реакции 2-меркаптобензотиазола с п,п'-дифенил-1,4-бензохиондииминном 93
- Забалов М.В., Тигер Р.П.*  
 Механизм каталитической перегруппировки Курциуса: исследование методом DFT 94
- Казянова М.В., Щербакова Е.В., Михайлова В.А.*  
 Сверхбыстрая динамика нетермического переноса электрона в «некондоновском» приближении 95
- Карпов С.В., Малков Г.В.*  
 Исследование кинетических закономерностей реакции уретанообразования при взаимодействии диизоцианатов с различными спиртами 96
- Кичигина А.О.*  
 Роль механизмов релаксации среды в кинетике горячей рекомбинации зарядов 97
- Коновалов А.С., Громов А.М., Гутнева Е.С., Певченко Б.В.*  
 Вода, как индикатор свойств поверхности частиц сферического высокодисперсного алюминия 98
- Корчагин О.В.*  
 Хемосорбция и электроокисление этанола на рутенийсодержащих катализаторах в щелочной среде 99

- Михайлов Р.В., Глазкова Н.И.*  
Исследование спектрально-кинетических особенностей  
реакции  $\text{CO} + \text{NO} + h\nu \rightarrow \frac{1}{2}\text{N}_2 + \text{CO}_2$  НА  $\text{TiO}_2$  НОМБИFINE  
N 100
- Ней В.Т., Самойлов В.О., Борисов Р.С., Шапин И.Ю.*  
Энергоёмкие алициклические молекулы в поле ионизи-  
рующих излучений 101
- Низовцев А.С., Бакланов А.В.*  
Механизм образования триоксида водорода 102
- Овчинников В.А., Крисяк Б.Э., Майоров А.В., Попов А.А.*  
Расчет многоконфигурационными методами реакции  
озонлиза деформированного и недеформированного  
цис- и транс-2-бутена 103
- Петрова Т.А., Петров Л.В., Психа Б.Л., Соляников В.М.*  
Галогенид-анионы - отрицательные катализаторы нера-  
дикального кислотного катализируемого окисления эпок-  
сида стирола в спиртовых растворах 104
- Рогозина М.В.*  
Проявление релаксации высокочастотных колебатель-  
ных мод в динамике обратных электронных переходов 105
- Темнова М.Л., Джабиева З.М.*  
Окисление воды соединениями церия (IV), катализиро-  
ванное двухъядерными и трёхъядерными комплексами  
рутения 106
- Титов В.В., Михайлов Р.В., Лисаченко А.А.*  
Фотоактивация кислорода на поверхности самосенсиби-  
лизированного наноструктурированного  $\text{TiO}_2\text{-TiO}_{2-x}$  107
- Трипачев О.В., Андоралов В.М.*  
Восстановление кислорода и пероксида водорода на РС-  
AU и катализаторе 20AU/C. Механизм автодеактива-  
ции поверхности 108
- Шматко Н.Ю., Джабиева З.М.*  
Окисление воды одноэлектронными окислителями в  
присутствии тетраядерного рутениевого комплекса 109

*Юркова М.П., Поздняков И.П., Плюснин В.Ф., Гривин В.П.*  
Первичные интермедиаты в фотохимии гербицида 2,4,5-трихлорфеноксисукусной кислоты в водных растворах 110

**СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ ТЕЛ 111**

*Бакланова Я.В., Таракина Н.В., Максимова Л.Г., Денисова Т.А.*  
Влияние дефектности структуры  $\text{Li}_2\text{TiO}_3$  на реакционную активность соединения 112

*Горнакова А.С.*  
Зернограничный фазовый переход смачивания в сплавах на основе циркония 113

*Ковалев И.Д., Коновалихин С.В.*  
Новые данные о структуре карбида бора с низкой концентрацией углерода 114

*Кранина Н.А., Васильева В.И., Сирота Е.А., Недосекин Ю.В., Малыхин М.Д.*  
Усовершенствованный способ расчета доли ионообменной и инертной составляющих поверхности гетерогенных ионообменных мембран 115

*Оводок Е.А., Ивановская М.И., Котиков Д.А.*  
Особенности структуры нанокompозитов  $\text{Au-In}_2\text{O}_3$  116

**НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ СОЗДАНИЯ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОМАТЕРИАЛОВ С ЗАДАННЫМИ СВОЙСТВАМИ И ФУНКЦИЯМИ 117**

*Абдршин А.Н., Асеев В.А., Колобкова Е.В., Никонов Н.В.*  
Спектрально-люминесцентные свойства свинцово-фторидной наностеклокерамики, активированной ионами хрома 118

*Аксёнова А.А., Авдин В.В.*  
Сорбционные, термолитические и морфологические свойства оксигидратов циркония, полученных в присутствии неионного ПАВ 119

- Антонов А.Ю., Сергеев М.О., Нуртдинова К.Ф., Ревина А.А., Боева О.А.*  
Каталитические свойства наночастиц серебра, синтезированных в обратномиицеллярных растворах, в зависимости от размера частиц 120
- Бакланова И.В., Красильников В.Н., Гырдасова О.И., Переляева Л.А., Кайгородова О.А.*  
Синтез, морфология и спектральные характеристики нанодисперсного оксида  $\text{Sc}_2\text{O}_3$ , допированного  $\text{Eu}^{3+}$  121
- Буланова М.А.*  
Получение сверхгидрофобной наноструктурированной поверхности полимера при помощи модификации ионно-трековым методом 122
- Васильева Н.В., Шелковников В.В., Орлова Н.А., Каргополова И.Ю., Ковалевский В.И.*  
Особенности записи фазовых голограмм в фотополимерных материалах, сенсibilизированных оксонольными красителями – производными барбитуровых кислот 123
- Голосова О.А., Иванов М.Б., Колобов Ю.Р., Манохин С.С., Зисман А.А.*  
Структура и механические свойства нового низкомолекулярного сплава на основе титана 124
- Гольщев А.А., Конов Д.Ю., Матюшенко Д.В., Шульга Ю.М., Молодец А.М.*  
Полиморфный переход наноструктурированного анатаза ( $\text{TiO}_2$ ) в ударных волнах 125
- Епифанова А.А., Магаев О.В., Водянкина О.В.*  
Влияние фосфорной кислоты на пористую структуру силикатных материалов 126
- Заводчикова А.А.*  
Нанопигменты и полимерные композиции на их основе 127
- Каданцева Н.В., Баскаков С.А., Мурадян В.Е.*  
Синтез и свойства оксида графена, функционализованного октадециламином 128

- Каймиева О.С., Шатохина А.Н., Тарасова О.А., Буянова Е.С., Жуковский В.М.*  
Получение и функциональные характеристики твердых растворов на основе ниобатов висмута 129
- Когтенкова О.А., Страумал Б.Б.*  
Изучение закономерностей образования структуры в алюминиевых сплавах 130
- Коробенков М.В., Скрипняк В.В., Козулин А.А., Кульков С.С.*  
Исследование физико-механических свойств наноструктурной керамики в условиях квазистатического и динамического нагружения 131
- Лазебная М.А., Колобов Ю.Р., Астахов М.В., Храмов Г.В., Гребцова Е.А.*  
Способы повышения биохимической активности гидроксипатита и создание композитов на его основе 132
- Лажно Е.И., Шехтман Г.Ш., Бурмакин Е.И., Плаксин С.В.*  
Электропроводность моноферрита рубидия, допированного двухзарядными катионами 133
- Маркевич А.В., Апостолова Р.Д., Шембель Е.М.*  
Сравнительные характеристики электрохимического взаимодействия электролитических металло-сульфидов с литием в исследованиях по методам импульсного потенциостатического титрования, циклической вольтамперометрии и сетевой термодинамики 134
- Мелкозерова М.А., Гырдасова О.И., Заболоцкая Е.В., Красильников В.Н.*  
Синтез и ЭПР исследование  $Zn_{1-x}Cu_xO$  ( $0 \leq x \leq 0.1$ ) 135
- Меляева А.А., Вакарин С.В., Семерикова О.Л., Плаксин С.В., Панкратов А.А., Зайков Ю.П.*  
Стадии формирования микрокристалла оксидной вольфрамовой бронзы гексагональной структуры при электролизе расплава 136
- Моденов Д.В., Докутович В.Н., Хохлов В.А.*  
Синтез наноразмерных частиц сложных оксидов в галогенидных расплавах, их выделение и диагностика 137

- Мясниченко В.С., Старостенков М.Д.*  
Исследование формы и структуры бинарных нанокластеров золото-медь при различных концентрациях компонент 138
- Некрасова Я.А., Асеев В.А., Игнатъев А.И., Никоноров Н.В.*  
Исследования влияния плазмонного резонанса на люминесценцию ионов эрбия и европия 139
- Нечаев Г.В., Бурмакин Е.И., Шехтман Г.Ш.*  
Твердые калийпроводящие электролиты в смешанных алюмоферритных системах 140
- Нуртдинова К.Ф., Сергеев М.О., Антонов А.Ю., Ревина А.А., Боева О.А.*  
Влияние способа восстановления на свойства наночастиц серебра образующихся в обратномцеллярном растворе 141
- Промахов В.В.*  
Исследование влияния термоударных нагрузжений на структуру и фазовый состав нанокристаллической керамики на основе  $ZrO_2$  142
- Сафонова Т.В., Авдин В.В.*  
Морфологические и физико-химические свойства оксигидратов иттрия, полученных темплатным методом синтеза 143
- Сергеев М.О., Антонов А.Ю., Жаворонкова К.Н., Ревина А.А., Боева О.А.*  
Физико-химические и каталитические свойства наночастиц платины 144
- Скрипняк В.В.*  
Структурные и фазовые переходы в гидроокислах алюминия 145
- Скрипняк Н.В.*  
Исследование влияния наноструктурированного поверхностного слоя на механическое поведение сплавов при высокоскоростной деформации 146

- Сорокина О.Н., Бычкова А.В., Коварский А.Л., Лагутина М.А., Дубровский С.А.*  
 Определение удлиненности агрегатов в магнитоанизотропных гелях 147
- Спесивцева И.В., Белова К.Г., Кочетова Н.А., Аниммица И.Е.*  
 Парциальные проводимости ( $O^{2-}$ ,  $H^+$ ,  $h^*$ ), термические и спектроскопические свойства твердых растворов  $Ba_2In_{2-x}M_xO_{5+\delta}$  ( $M = Al^{3+}, W^{6+}$ ) 148
- Судоргин С.А., Лебедев Н.Г., Белоненко М.Б.*  
 Влияние электрического поля на диффузионные и проводящие свойства биграфеновых лент 149
- Таланцев А.Д., Дмитриев А.И., Зайцев С.В., Моргунов Р.Б.*  
 Взаимосвязь намагниченности  $\delta$ - $\langle Mn \rangle$ -слоя и поляризации фотолюминесценции квантовой ямы  $InGaAs/GaAs$  на вицинальных и сингулярных гранях  $GaAs$  150
- Тарасова Н.А., Филинкова Я.В., Аниммица И.Е.*  
 Синтез и транспортные свойства новых фтор-замещенных проводников на основе  $Ba_2In_2O_5$  151
- Тимошина А.В., Колесников Н.Н., Борисенко Е.Б., Борисенко Д.Н.*  
 Керамические материалы на основе соединений  $A^{II}B^{VI}$  для оптических применений 152
- Ушеренко Ю.С., Шведов С.В., Белоус А.И., Турцевич А.С.*  
 Производство новых коррозионно стойких композиционных алюминиевых материалов 153
- Филиппович Е.А., Ивановская М.И., Котиков Д.А., Паньков В.В., Новикова З.А., Коробко Е.В., Журавский Н.А.*  
 Особенности структуры поверхностно модифицированных частиц оксида железа и магнитоэлектрореологические свойства суспензий на их основе 154
- Черненькая А.С., Дмитриев А.И., Курман М.В., Моргунов Р.Б.*  
 Спиновая динамика носителей заряда в  $\alpha'$ - и  $\beta$ -(BEDT-TTF) $_2IBr_2$  155



- Шевченко Н.Н., Меньшикова А.Ю., Евсеева Т.Г., Николенко Д.Ю., Бричкин С.Б.*  
Трехмерно-упорядоченные наноконпозиты на основе монодисперсных полимерных частиц 156
- Шеринёв В.А., Джардималиева Г.И., Помогайло А.Д.*  
Соли ацетилендикарбоновой кислоты как прекурсоры металлополимерных наноконпозитов: синтез и свойства 157
- Шипачев А.Н., Суглобова И.К., Зелепугин С.А.*  
Численное моделирование пластического деформирования титановых образцов по динамической схеме канально-углового прессования 158
- ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА ПРОЦЕССОВ ОБРАЗОВАНИЯ И МОДИФИКАЦИИ ПОЛИМЕРОВ 159**
- Батуашвили М.Р., Пискарев М.С., Яблоков М.Ю., Гильман А.Б., Кузнецов А.А.*  
Модифицирование поверхности пленок поливинилиденфторида и сополимера винилиденфторида с гексафторпропиленом в разряде постоянного тока 160
- Бурмистр О.М., Свердликовская О.С., Бурмистр М.В., Шапка В.Х.*  
Наноматериалы на основе триацетата целлюлозы и полиионенов 161
- Валетдинов Д.А., Кудинова О.И., Гринев В.Г., Крашенинников В.Г., Чмутин И.А., Дубникова И.Л., Новокшонова Л.А.*  
Высоконаполненные композиционные материалы на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена и нанодисперсных частиц алюминия с оксидным барьерным покрытием 162
- Кленина Н.С., Карпова С.Г., Шеринев В.А., Иорданский А.Л.*  
Влияние агрессивных сред на структурно-динамические параметры биоконпозитов сополимера поли(3-гидроксibuтират-со-3-гидроксивалерат)а и сегментированного полиуретана 163

- Корж Н.Н., Шибряева Л.С., Попов А.А.*  
Термоокислительная деструкция композиционных материалов на основе полипропилена и этиленпропиленовых сополимеров 164
- Кувардина Е.В., Дубникова И.Л., Новокшионова Л.А., Крашенинников В.Г., Ломакин С.М., Абрамчук С.С.*  
Влияние смесевой технологии получения композитов на основе полипропилена и углеродных нанонаполнителей на их структуру и свойства 165
- Кулагина Г.С., Ольхова О.М., Бадамшина Э.Р., Писарев С.А., Чалых А.Е.*  
Кинетика кристаллизации в смесях олигомеров и полимеров на основе (3,3-бис-(азидометил)оксетана) - БАМО и (3-азидометил-3-метилоксетана) - АММО 166
- Куница А.А., Шестаков А.Ф., Ким И.П.*  
Квантово-химический анализ реакций переноса цепи при теломеризации тетрафторэтилена в различных растворителях 167
- Макеев М.О., Иванов Ю.А., Мешков С.А., Гильман А.Б., Яблоков М.Ю.*  
Исследование методом ИК-спектроскопии (ИК-СЭ) свойств поверхности политетрафторэтилена, модифицированной в низкотемпературной плазме 168
- Малков Г.В., Джалмуханова А.С., Лодыгина В.П., Комратова В.В., Бадамшина Э.Р.*  
Исследование процессов формирования разветвленных полиизоциануратов при полициклотримеризации изофорондиизоцианата 169
- Мамыкин Д.А., Антипин В.А.*  
О роли двухквантовых фотопроецессов в рекомбинационной люминесценции при фотолизе полиарилефталатов 170
- Моцарь А.С.*  
Суперионные полимерные материалы 171
- Назирова О.Д., Бревнов П.Н., Крашенинников В.Г., Новокшионова Л.А., Покидько Б.В., Щербина М.А.*

- Органомодификация монтмориллонита для совершенствования процесса синтеза нанокompозитов 172
- Пожлад С.В., Тарасов А.Е., Ольхова О.М., Эстрин Я.И., Бадамшина Э.Р.*  
Катионная сополимеризация замещенных оксетанов 173
- Свидченко Е.А., Сурин Н.М., Кузнецов А.А., Семенова Г.К., Сиган А.Л.*  
Контролируемая радикальная фотополимеризация винилацетата в присутствии комплекса  $Co(II)$  174
- Силантьев М.А., Курочкин С.А., Перепелицина Е.О., Грачев В.П.*  
Радикальная полимеризация в присутствии кислорода — новый перспективный способ синтеза высокоразветвленных полимеров 175
- Старчак Е.Е., Ушакова Т.М., Новокшонова Л.А.*  
Сополимеризация этилена с гексенем-1 на иммобилизованных металлоценовых катализаторах 176
- Хватов А.В., Шишкина В.П., Габдуллина А.И., Луканина Ю.К., Колесникова Н.Н., Попов А.А.*  
Создание новых биоразлагаемых полимерных композиций на основе ПЭНП и природных добавок 177
- Цветкова Д.С., Богданова Ю.Г., Костина Ю.В., Грингольц М.Л., Алентьев А.Ю., Финкельштейн Е.Ш.*  
Сравнение адгезионных свойств аддитивных и метатезисных полинонборненов 178
- Юхаева Г.Р., Назирова О.Д., Бревнов П.Н., Гринев В.Г., Крашенинников В.Г., Новокшонова Л.А., Чмутин И.А., Синевич Е.А.*  
Нанокompозиционные материалы на основе полиэтилена и нанопластин графита: синтез, структура, свойства 179
- ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ И НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ 181**

*Александрова Н.А., Лобова Н.А., Ведерников А.И., Громов С.П.*

- Синтез и свойства краунсодержащих и модельных гетарилфенилацетиленов и ацетиленильных красителей 182
- Буданов Б.А., Далидчик Ф.И., Ковалевский С.А.*  
Туннельная спектроскопия гетерополисоединений 183
- Буйко О.В., Лосев В.Н.*  
Сорбенты на основе силикагелей, последовательно модифицированных полигексаметиленгуанидином и производными хромотроповой кислоты, для концентрирования и определения цветных и редкоземельных металлов 184
- Бычкова А.В., Сорокина О.Н., Коварский А.Л., Леонова В.Б., Розенфельд М.А., Шапиро А.Б.*  
Многофункциональные полимерные покрытия на магнитных наночастицах. проблемы и решения 185
- Гордосевич К.М., Тихонов А.П., Попова Г.В.*  
Получение наночастиц металлов для конструирования квантовых дотов различной природы 186
- Звездин К.В., Лаптев А.В., Беликов Н.Е., Лукин А.Ю., Демина О.В., Швец В.И., Бричкин С.Б., Николенко Д.Ю., Ходонов А.А.*  
Исследование спектральных свойств производных спириранов 187
- Кирсанкин А.А., Гришин М.В., Шуб Б.Р.*  
Физические свойства и структура наночастиц на основе золота и никеля, осажденных на поверхность графита методом лазерного диспергирования 188
- Кудряшова Ю.Р., Ибрагимова А.Р., Захарова Л.Я.*  
Водные и водно-органические супрамолекулярные системы на основе неионного ПАВ BRIJ-35 189
- Лобанов А.В., Клименко И.В., Неврова О.В., Журавлева Т.С.*  
Влияние биогенных фотохромных акцепторов электрона на флуоресценцию хлорофилла 190

- Метелица С.И., Лосев В.Н., Дидух С.Л.*  
 Формирование супрамолекулярных ансамблей на поверхности неорганических оксидов 191
- Никифоров А.С., Фомина М.В., Ведерников А.И., Кузьмина Л.Г., Громов С.П.*  
 Новые цианиновые красители и светочувствительные супрамолекулярные системы на их основе 192
- Пак А.В., Белоненко М.Б., Лебедев Н.Г.*  
 Косвенное взаимодействие в примесном бислое графена 193
- Паладичева А.В., Ванцян М.А., Шуленкина А.В., Беседин С.П.*  
 Исследование поверхности мультислоев некоторых гетероцепных полимеров методом АСМ 194
- Паширова Т.Н., Кашапов Р.Р., Жильцова Е.П., Лукашенко С.С., Захарова Л.Я., Коновалов А.И.*  
 Мицеллообразование и катализ в системе 1-гексадецил-1-азониабцикло[2.2.2]октан бромида 195
- Пронкин П.Г., Татиколов А.С., Шведова Л.А., Сульtimoва Н.Б.*  
 Безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения в парах цианиновых красителей в присутствии ДНК 196
- Савин И.В., Лобова Н.А., Дмитриева С.Н., Ведерников А.И., Ушаков Е.Н., Громов С.П.*  
 Димеризация и автофотоциклоприсоединение аммонийных производных краунсодержащих стирильных красителей 197
- Султанбаев М.В., Остахов С.С., Хурсан С.Л., Ганцев Ш.Х., Ахмадеева Г.Х.*  
 Спектрально-флуоресцентные свойства и устойчивость супрамолекулярных комплексов включения таутомеров 5-фторурацила с  $\beta$ -циклодекстрином 198
- Уваров М.Н., Кулик Л.В., Пичугина Т.И., Дзюба С.А.*  
 исследование формы линии спектров ЭПР триплетного фуллерена C70, полученных под непрерывным светом:

распределение параметров расщепления в нулевом поле	199
<i>Шлотгауэр А.А., Крупна А.И., Лешина Т.В.</i>	
Изучение антиоксидантных свойств антигиперлипидемического препарата аторвастатина (АТR) физическими методами	200
<b>ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА БИОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ</b>	
<b>201</b>	
<i>Авдеева Л.В., Тухватуллин И.А., Гвоздев Р.И.</i>	
Роль меди и железа в биологическом окислении метана мембраносвязанной метанмонооксигеназой	202
<i>Акимкин Т.М., Татиколов А.С., Ярмолюк С.М.</i>	
Спектральное исследование взаимодействия катионных тиакарбоцианинов с гиалуроновой кислотой	203
<i>Антропова И.Г., Ревина А.А., Чжоу Зин Хтунг</i>	
Спектрофотометрические исследования радиационно-химических превращений кумаринов в обратно-мицеллярных растворах	204
<i>Байкова И.С., Саратовских Е.А., Козлова Н.Б., Штамм Е.В.</i>	
Биохимические механизмы формирования токсического воздействия пестицидов и их металлокомплексов	205
<i>Маракулина К.М., Крамор Р.В., Луканина Ю.К., Мазалецкая Л.И., Шелудченко Н.И., Шишкина Л.Н.</i>	
Физико-химические характеристики изоборнилфенолов в модельных системах	206
<i>Мищенко Д.В., Рыбкин А.Ю., Корнев А.Б., Файнгольд И.И., Хакина Е.А., Полетаева Д.А., Смолина А.В., Котельникова Р.А., Трошин П.А., Богданов Г.Н., Романова В.С.</i>	
Ингибирование пероксидного окисления липидов водорастворимыми производными фуллерена C <sub>60</sub>	207
<i>Пъи Пъо Аунг, Фенин А.А., Шарпатый В.А.</i>	
Радиационная деструкция полисахаридных гидрогелей	208

- Рыбкин А.Ю., Мищенко Д.В., Хакина Е.А., Корнев А.Б., Смолина А.В., Трошин П.А., Богданов Г.Н., Котельникова Р.А., Котельников А.И.*  
Оценка антиоксидантных свойств водорасстворимых производных фуллерена C<sub>60</sub> методом хемилюминесценции 209
- Рыжкова О.В., Круговов Д.А., Алесенко А.В.*  
Роль антиоксидантных и липопротекторных свойств акатинола мемантина при лечении болезни Альцгеймера 210
- Смолина А.В., Корнев А.Б., Полетаева Д.А., Хакина Е.А., Файнгольд И.И., Рыбкин А.Ю., Мищенко Д.В., Котельникова Р.А., Богданов Г.Н., Трошин П.А., Котельников А.И.*  
влияние водорастворимых полизамещенных производных фуллерена C<sub>60</sub> на каталитическую активность мембраносвязанных ферментов моноаминоксидазы А и моноаминоксидазы В 211
- Соколова Е.М., Руднева Т.Н., Нешев Н.И., Психа Б.Л., Санина Н.А., Блохина С.В.*  
Пероксинитритзависимый гемолиз эритроцитов под действием сера-нитрозильных комплексов железа 212
- Фенин А.А., Шубина П.А., Пьи Пьо Аунг, Шарпатый В.А.*  
Особенности радиационной деструкции фенольных соединений в структурированных системах 213
- Филиппова К.Н., Клименко И.В., Журавлева Т.С., Мисин В.М., Кузнецов Ю.В.*  
Разработка стандартного образца состава антиоксиданта на основе амбиол гидрохлорида 214
- Часовская Т.Е., Пальмина Н.П.*  
Влияние фенозана калия на структуру плазматических мембран in vitro 215
- Шупик М.А., Алесенко А.В., Ванин А.Ф., Микоян В.Д.*  
Взаимодействие сигнальных систем оксида азота и сфингомиелинового цикла при ишемии/реперфузии 216
- НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ НОВЫХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ 217**

- Воробьева Е.А., Васильева В.И.*  
 Применение ионообменных мембран разной природы и структуры при выделении ароматической аминокислоты из сахаросодержащих сред микробиологического синтеза стационарным диализом 218
- Коровина Н.А., Розенцвет В.А.*  
 Синтез катионного поли-1,3-пентадиена под действием комплекса Густавсона 219
- Разметов А.Н., Шаповалова О.В.*  
 Конверсия природного газа в синтез-газ и водород в объемных пенометаллических матрицах 220
- Фокин И.Г.*  
 Конверсия индивидуальных компонентов при окислении смесей легких алканов 221
- НОВЫЕ И ВОЗОБНОВЛЯЕМЫЕ ИСТОЧНИКИ ЭНЕРГИИ. АЛЬТЕРНАТИВНАЯ ЭНЕРГЕТИКА 223**
- Баскакова Ю.В., Ярмоленко О.В., Богданова Л.М., Джавадян Э.А., Ефимов О.Н.*  
 Синтез и электрохимические свойства гель-электролитов на основе полиэфирдиакрилатов и 1 М LiClO<sub>4</sub> в гамма-бутиролактоне 224
- Ковычева Н.Н.*  
 Полимерные полупроводниковые катоды для литиевых хит прямого контакта 225
- Новожилов Е.П.*  
 Конденсатор с двойным электрическим слоем на твердом полимерном электролите 226
- Писарева А.В., Писарев Р.В., Добровольский Ю.А.*  
 Протонпроводящие гель-электролиты на основе поливинилового спирта и бензолсульфоновых кислот 227
- Пономарёва М.Ю.*  
 Получение молекулярного водорода из воды посредством нанопорошков алюминия 228



<i>Тронь А.В., Шембель Е.М., Максюта И.М., Тутык В.А.</i> Аморфные твердые электролиты на основе $\text{Li}_2\text{O-LiF-P}_2\text{O}_5$ для литиевых и литий-ионных источников тока	229
<i>Тулибаева Г.З., Хатмуллина К.Г.</i> Квантово-химическое моделирование структуры полимерных электролитов на основе полиэфирдиакрилата, этиленкарбоната и $\text{LiClO}_4$	230
Авторский указатель	232
Список организаций	239
Список зарегистрированных участников	244



# УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

# ПРИМЕНЕНИЕ ПРОТОННОЙ РАДИОГРАФИИ НА УСКОРИТЕЛЕ ИТЭФТВН В ИССЛЕДОВАНИЯХ УДАРНО-ВОЛНОВЫХ И ДЕТОНАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Бабочкин К.А.*, <sup>1</sup>*Савченко А.В.*, <sup>2</sup>*Смирнов Г.Н.*,  
<sup>1</sup>*Терновой В.Я.*, <sup>2</sup>*Туртиков В.И.*, <sup>1</sup>*Уткин А.В.*,  
<sup>2</sup>*Шестов Л.М.*, <sup>1</sup>*Шилкин Н.С.*, <sup>1</sup>*Юрьев Д.С.*, <sup>1</sup>*Якушев В.В.*,  
<sup>2</sup>*Шарков Б.Ю.*, <sup>1</sup>*Фортос В.Е.*, <sup>\*1</sup>*Колесников С.А.*,  
<sup>2</sup>*Голубев А.А.*, <sup>1</sup>*Дудин С.В.*, <sup>2</sup>*Канцырев А.В.*, <sup>1</sup>*Лавров В.В.*,  
<sup>1</sup>*Мицнев В.Б.*, <sup>1</sup>*Николаев Д.Н.*  
<sup>1</sup>*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*, <sup>2</sup>*ИТЭФ, Москва, Россия*  
*\*ksa@icp.ac.ru*

Метод радиографического исследования вещества с использованием высокоэнергетических пучков заряженных частиц предоставляет уникальные возможности для получения изображений распределения плотности вещества внутри плотных оптически непрозрачных объектов непосредственно в условиях быстропротекающего эксперимента. Важной особенностью данного метода является возможность многокадровой съёмки в импульсном режиме. При изучении ударно-волновых и детонационных процессов это позволяет определять их динамические параметры, такие как скорость и пространственная структура волновых фронтов. На базе ускорителя ТВН-ИТЭФ на пучке протонов с энергией 800 МэВ авторами создана протонно-радиографическая установка для исследования ударно-волновых и детонационных процессов в веществе в экстремальных условиях. Установка обеспечивает регистрацию до 3 кадров динамических процессов в одном эксперименте с пространственным и временным разрешением 50 мкм и 70 нс соответственно. Для создания ударных волн в исследуемых объектах используется энергия взрывчатых веществ (ВВ), поэтому экспериментальные мишени располагаются внутри взрывозащитной камеры ёмкостью до 100 г ВВ в тротиловом эквиваленте. На данной установке проведены исследования взрывных и детонационных процессов в прессованных и эмульсионных ВВ, ударных волн в плотной неидеальной плазме аргона и ксенона, ударно-волнового нагружения неоднородных металлических поверхностей. Проводится отработка новых компактных взрывных генераторов, разработанных для протонно-радиографического исследования структурных фазовых переходов в конденсированных средах в экстремальных условиях.

---

<sup>1</sup>Работа проведена в рамках Госконтрактов №№Н.4е.4503101016 и Н.4е.4590101055 и Программы Президиума РАН №12.

# ИЗУЧЕНИЕ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ АНИОН-РАДИКАЛОВ ТРИФТОРБЕНЗОЛОВ МЕТОДОМ ОПТИЧЕСКИ ДЕТЕКТИРУЕМОГО ЭПР<sup>1</sup>

<sup>\*2</sup>*Блинкова С.В.*, <sup>3</sup>*Береговая И.В.*, <sup>3</sup>*Щеголева Л.Н.*,  
<sup>1</sup>*Багрянский В.А.*

<sup>1</sup>*ИХКГ СО РАН, Новосибирск, Россия*, <sup>2</sup>*НГУ, Новосибирск, Россия*,  
<sup>3</sup>*НИОХ СО РАН, Новосибирск, Россия*

\**blinkova@kinetics.nsc.ru*

Интерес к анион-радикалам (АР) фтораренов вызван особенностями их электронного и пространственного строения. Высокая чувствительность констант СТВ с ядрами <sup>19</sup>F к структурным параметрам делает ЭПР спектроскопию эффективным инструментом исследования электронного строения АР фтораренов. При этом, высокая реакционная способность таких АР затрудняет их создание в достаточных стационарных концентрациях. Однако применение такой модификации метода ЭПР, как оптически детектируемый ЭПР (ОД ЭПР), позволяет получать спектры этих ион-радикалов в жидких растворах при обычных температурах. Квантовохимические расчеты поверхности потенциальной энергии АР 1,2,4-ТФБ позволили установить, что она имеет сложное многоямное строение и является поверхностью псевдотвращения. В ходе работы был впервые получен спектр ЭПР АР 1,2,4-ТФБ. Изменение температуры образца в диапазоне 240-310 К вызывает сдвиг линий в спектре, связанный с изменением наблюдаемых значений констант СТВ. Сопоставление результатов квантовохимических расчетов с экспериментальными данными показывает, что учет вклада нескольких неплоских структур в приближении быстрого обмена между ними качественно верно описывают характер температурной зависимости констант СТВ с ядрами <sup>19</sup>F в АР 1,2,4-ТФБ. Недавно методом ОД ЭПР в сочетании с квантовохимическими расчетами было показано, что АР 1,3,5-трифторбензола (ТФБ) в жидком растворе совершают быстрые переходы между различными конформациями с нарушенной благодаря эффекту Яна-Теллера симметрией. В данной работе изучена температурная зависимость спектров ОД ЭПР АР 1,3,5-ТФБ в разных растворителях. Установлено, что в диапазоне температур 240-310 К быстрый обмен между неплоскими конформациями сохраняется, а падение сигнала АР при понижении температуры в высоковязком растворителе сквалане, по-видимому, связано с проявлением анизотропии СТВ при замедлении вращательной диффузии.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке Программы поддержки ведущих научных школ (грант НШ-4249.2010.3).

## АГРЕГАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА И КАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ АЛКИЛТРИФЕНИЛФОСФОНИЙ БРОМИДОВ

<sup>\*1</sup>*Вагапова Г.И.*, <sup>1</sup>*Валеева Ф.Г.*, <sup>1</sup>*Ибрагимова А.Р.*,  
<sup>1</sup>*Гайнанова Г.А.*, <sup>1</sup>*Захарова Л.Я.*, <sup>1</sup>*Сякаев В.В.*,  
<sup>2</sup>*Галкина И.В.*, <sup>2</sup>*Тудрий Е.В.*, <sup>1</sup>*Ризванов И.Х.*,  
<sup>2</sup>*Романов А.О.*

<sup>1</sup>*ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань, Россия*, <sup>2</sup>*КФУ, Казань, Россия*

\*rain2114@yandex.ru

Катионные поверхностно-активные вещества (ПАВ), находящие широкое применение в качестве антифунгицидальных, антибактериальных и антисептических агентов представляют большой интерес. В связи с тем, что в медицинской практике наибольшее распространение получили фосфорорганические лекарственные препараты, исследование амфифильных фосфониевых солей и регулирование их реакционной способности является актуальной задачей. В данной работе в качестве объекта исследования был выбран ряд алкилтрифенилфосфоний бромидов (ТФФБ-*R*) различной гидрофобности. Методами тензиометрии, кондуктометрии, ЯМР-самодиффузии была изучена самоорганизация этого ряда. Методом динамического светорассеяния были получены размеры агрегатов в водных растворах ТФФБ равные 1.8-4.2 нм. Дзета потенциал ТФФБ оказался равным 60-65 мВ, однако для цетилтриметиламмоний бромида (наиболее распространенного катионного ПАВ) он составляет 90 мВ. Можно объяснить это следующим образом: 1) происходит свободная сборка мономеров в мицеллы благодаря низким числам агрегации и 2) высокая степень связывания противоиона приводит к компенсации поверхностного заряда мицеллы. В нашей работе проводилось также исследование каталитической активности ТФФБ-*R* на реакциях щелочного гидролиза *O*-алкил-*O*-*p*-нитрофенилхлорметилфосфонатов и кросс-сочетания Сузуки. Константа скорости для щелочного гидролиза в присутствии ТФФБ выше на порядки, чем без него. А выход продуктов реакции кросс-сочетания составил в пределах от 20 до 96% в зависимости от гидрофобного радикала ПАВ и от его концентрации. Таким образом, нами изучен ряд поверхностно-активных алкилтрифенилфосфоний бромидов, отличающихся низкой ККМ и высокой каталитической активностью в ряду органических реакций.

# ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИКИ ЦЕПНЫХ ОБРАТИМЫХ РЕАКЦИЙ В СИСТЕМЕ ХИНОНИМИН + ГИДРОХИНОН, ПРОТЕКАЮЩИХ С ДЛИТЕЛЬНЫМИ ПЕРИОДАМИ НЕСТАЦИОНАРНОСТИ

*\*Гадомский С.Я., Варламов В.Т.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*gadomsky@rambler.ru*

Механизм цепных обратимых реакций хинониминов с гидрохинонами представляет значительный интерес для практики, так как моделируют реакции хинонов с гидрохинонами, лежащие в основе механизма защитного действия биоантиоксидантов хинонного типа (убихинонов и витаминов группы К). С другой стороны, изучение кинетики цепных обратимых реакций в системах хинонимин + гидрохинон позволяет получать уникальные данные о реакционной способности устойчивых участников реакции и промежуточных семихинонных радикалов. Ряд уникальных особенностей был выявлен нами при изучении цепной реакции N,N'-дифенил-1,4-бензохинондиимина (QDI) с 2,5-дихлоргидрохиноном ( $\text{Ar}(\text{OH})_2$ ). Оказалось, что эта реакция имеет очень длинные цепи ( $10^4$ – $10^5$  звеньев), так что ее можно изучать при очень малых скоростях инициирования  $10^{-11}$ – $10^{-10}$  моль л<sup>-1</sup>с<sup>-1</sup>. В отсутствие инициатора реакция имеет четко выраженные периоды автоускорения, которые, как это было установлено нами, обусловлены большой длительностью достижения стационарных концентраций радикалами, ведущими цепь. Наконец, мы установили также, что кинетические закономерности реакции в присутствии инициатора зависят от порядка смешения реагентов и инициатора. В настоящей работе мы разработали подход к изучению и кинетическому анализу описанных выше цепных обратимых реакций в системе хинонимин + гидрохинон, имеющих ряд особенностей, обусловленных большой длительностью периодов нестационарности. В качестве основных кинетических характеристик в этом подходе используются скорость реакции в точке перегиба кинетической кривой расходования QDI и время достижения квазистационарного состояния. С использованием этого подхода мы впервые провели кинетическое изучение реакции N,N'-дифенил-1,4-бензохинондиимина с 2,5-дихлоргидрохиноном в трех растворителях (хлорбензол, бензол и декан) в нестационарном и квазистационарном режимах. В каждом из растворителей был получен набор из 12 констант скорости всех элементарных стадий цепной обратимой реакции QDI с  $\text{Ar}(\text{OH})_2$ . Выявлено сильное влияние среды на кинетику реакции.

# ИЗОТОПИЧЕСКИ СЕЛЕКТИВНАЯ ЛАЗЕРНАЯ ДИССОЦИАЦИЯ 2-ХЛОРЭТИЛТРИФТОРСИЛАНА

*Дементьев П.С.*

*ИХКГ СО РАН, Новосибирск, Россия*

*dementyev@kinetics.nsc.ru*

Прогресс в нанотехнологической отрасли предъявляет особые требования к чистоте материалов, в том числе и к их изотопному составу [1]. Так, успехи в создании квантового компьютера на основе кремниевых изотопных гетероструктур сделали актуальной потребность в изотопически чистом кремнии [2]. Однако стоимость производства редких изотопов кремния на существующей газодиффузионной технологии очень высока, поэтому большие усилия прилагаются для развития альтернативного метода разделения. Среди них выгодно отличается лазерный метод (*MLIS – molecular laser isotope separation*). В нашей лаборатории была реализована уникальная схема MLIS кремния на базе 1,2-дихлорэтилтрифторсилана [3]. Это вещество под действием излучения инфракрасного лазера подвергается реакции бета-элиминирования с образованием молекулярных продуктов. Были получены рекордные значения изотопической селективности по изотопам  $^{29}\text{Si}$  и  $^{30}\text{Si}$ . Для того чтобы выбрать субстрат оптимальный для процесса MLIS мы продолжили исследования инфракрасной фотохимии галогеналкилфторсиланов. В первую очередь был изучен недорогой 1,2-дибромэтилтрифторсилан, который, как оказалось, диссоциирует по радикальному механизму и непригоден для разделения изотопов. Настоящая работа посвящена фотодиссоциации 2-хлорэтилтрифторсилана. Инфракрасный спектр вещества имеет мощное поглощение в области генерации углекислотного лазера. Фотохимические эксперименты показали, что 2-хлорэтилтрифторсилан также как 1,2-дихлорэтилтрифторсилан претерпевает бета-распад. Реакция проходит с высоким выходом, а ее продукты могут быть легко отделены друг от друга и от исходного вещества. По-видимому, исследуемый субстрат представляет интерес для технологии MLIS кремния.

## Литература

- [1] Eugene E. Haller // J. Nucl. Sci. and Tech. 2002. V. 39. P. 382.
- [2] Kohei M. Itoh // Solid State Commun. 2005. V. 133. P. 747.
- [3] P. V. Koshlyakov et. al. // Appl. Phys. B. 2009. V. 97. P. 625.



## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ УПРАВЛЯЮЩИХ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА ФИЛЬТРАЦИОННОГО ГОРЕНИЯ В ПРИСУТСТВИИ МЕТАЛЛОВ

*\* Заславский Г.Е., Манелис Г.Б.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*zaslavskyge@gmail.com*

Одним из направлений фильтрационного горения является фильтрационное горение в присутствии соединений металлов. Предложена математическая модель, позволяющая описать ситуацию выноса существенной части пара из реактора в процессе фильтрационного горения в спутном режиме. Рассмотрен простейший вариант такой модели, а именно, конечная одномерная адиабатическая модель со стационарным фронтом горения. Фронт горения поддерживается стационарным, под этим понимается, что он поддерживается на некотором расстоянии вблизи торца реактора. Предполагается, что расстояние между торцом, откуда поступает шихта, и фронтом горения достаточно для того, чтобы шихта, движущаяся к фронту, нагрелась до температуры во фронте горения - таким образом, температуры обеих фаз во фронте одинаковы и равны адиабатической температуре горения. Считали, что в реакторе пар металлосодержащих компонентов в каждом сечении является насыщенным. Модель применена для исследования ряда металлов и их оксидов (Zn, Cd, Hg, As, Se, Tl, MoO<sub>3</sub>, ReO<sub>3</sub>, SeO, TeO, TaO). Получены профили температур фаз и плотностей пара металлосодержащих компонентов. Исследованы зависимости температуры газа и плотности пара металлосодержащих компонентов на торце, а также степени извлечения металла от управляющих параметров (доли металлосодержащих компонентов и угля в шихте, скорости фильтрации газа, размера частиц). Выявлены области управляющих параметров, благоприятствующие максимальной степени извлечения тех или иных металлосодержащих компонентов.

# ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ В ИНДОКАРБОЦИАНИНЕ И ЕГО ЦИКЛИЧЕСКИХ И АНГУЛЯРНЫХ БИС-ХРОМОФОРАХ<sup>1</sup>

*\*Кашапова Э.Р., Майер Г.В., Артюхов В.Я.*

*ТГУ, Томск, Россия*

*\*ekashapova1@rambler.ru*

В работе представлены результаты теоретического исследования спектрально-люминесцентных свойств и электронного строения методом частичного пренебрежения дифференциальным перекрытием (ЧПДП) со спектроскопической параметризацией [1] индокарбоцианина и его бис-хромофоров [2]. В расчете использована модельная геометрия. Установлено, что при электронном возбуждении в  $S_1$  состоянии происходит уменьшение дипольного момента для всех исследованных соединений, что в случае мономера индокарбоцианина согласуется с отрицательной сольватохромией данного соединения. В спектрах циклических бис-хромофоров главный максимум поглощения сдвинут в коротковолновую область по сравнению со спектром мономера индокарбоцианина. В случае циклических бис-цианинов ниже  $S_1$  состояние образовано электронным переходом с ВЗМО на НВМО, локализованных на атомах углерода полиметиновой цепи одного хромофора, и электронным переходом с ВЗМО-1 на НВМО+1, локализованных на атомах углерода ПЦ другого хромофора. Показано, что увеличение числа метиленовых групп, связывающих два хромофора, приводит к увеличению энергетического зазора между  $S_1$  и  $S_2$  состояниями. Установлено, что наибольшее изменение электронной плотности при электронном возбуждении связано с атомами углерода ПЦ.

## Литература

- [1] Майер Г.В., Артюхов В.Я., Базыль О.К. и др. // Новосибирск: Наука: 1997. 232 с.
- [2] Chibisov A.K., Zakharova G.V., Gerner H. et. al. // J. Phys. Chem. 1995. V. 99. P. 886.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (госконтракты № П 1128, мероприятие 1.2.1 и № 02.740.11.0444, мероприятие 1.1) и гранта Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ РФ (НШ-4297.2010.2).

# ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ МОДИФИЦИРОВАНИЕ ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В РАЗЛИЧНЫХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

*\* Комарова Н.С., Кривенко А.Г.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*komarova@icp.ac.ru*

С целью разработки электрохимических способов функционализации углеродных одностенных нанотрубок (ОСНТ) в мягких условиях было проведено сравнительное модифицирование наноструктур в средах различной природы. В качестве таковых в данной работе были выбраны вода и ДМСО, являющиеся антиподами относительно средства соответствующих растворов к графеновой поверхности нанотрубок [1]. Обнаружено, что ёмкость двойного электрического слоя одного и того же нанотрубного электрода в ДМСО существенно больше, чем в водном растворе. Этот факт свидетельствует о большей доступности поверхности ОСНТ электролиту в данной среде по сравнению с водным раствором. При проведении электролиза растворов бромида калия в обоих растворителях происходит рост ёмкости электрода: в 12-50 раз для водного раствора при временах обработки 50-60 мин и только в 2 раза для ДМСО при  $t=80$  мин. Анализ рентгеновских фотоэлектронных спектров образцов, обработанных в разных растворителях, показал, что при электролизе происходит функционализация поверхности ОСНТ, основным каналом которой является окисление, а не галогенирование. Так, в водном растворе на один атом кислорода приходится 4 атома углерода по сравнению с 14 в ДМСО при удельных ёмкостях электродов 60 Ф/г и 10 Ф/г соответственно. При этом на один атом брома, находящийся на поверхности ОСНТ, приходится примерно 300 атомов углерода в растворах ДМСО, по сравнению с 30 для водного раствора. Сделан вывод, что повышение значения ёмкости электродов однозначно связано с прививкой к поверхности ОСНТ кислородсодержащих функциональных групп.

## Литература

- [1] Pavese M, Musso S, Bianco S, Giorelli M, Pugno N. An analysis of carbon nanotube structure wettability before and after oxidation treatment. J Phys Condens Matter 2008, V. 20, pp. 474206–474213.

# ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ НАНО- И ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ КАК ОСНОВА MRAM И SPIN-LED<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Коплак О.В.*, <sup>\*</sup><sup>2</sup>*Дмитриев А.И.*, <sup>2</sup>*Моргунов Р.Б.*  
<sup>1</sup>УНЦ «ФХМ» КНУ им. Т.Шевченко и НАНУ, Киев, Украина,  
<sup>2</sup>ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия  
<sup>\*</sup>aid@icp.ac.ru

Обсуждаются фундаментальные основы управления спиновой поляризацией носителей заряда, открывающие новые возможности создания спиновых электронных приборов, основанных на размерных эффектах в нано- и гетероструктурах магнитных полупроводников [1], которые совместимы с элементной базой электронно-оптических приборов. Исследованные нано- и гетероструктуры магнитных полупроводников являются прообразами (предшественниками) MRAM (магниторезистивная память) и spin-LED (спиновый светодиод). В настоящей работе в качестве отдельных битов MRAM предлагается использовать упорядоченные ферромагнитные нанопроволоки [2], например, GeMn. Этот подход позволит достичь уникально высокой плотности хранения информации. В spin-LED спин-поляризованные носители инжектируются из ферромагнитного контакта GaMnAs, объединенного с квантовой ямой InGaAs/GaAs [3]. Spin-LED позволяет количественно анализировать поляризацию спинов носителей заряда в полупроводнике, инжектированных из любого контакта. Spin-LED может быть также использован для передачи информации с помощью спин-кодов. Полученные результаты служат также экспериментальной основой для построения теории перколяционных магнитных фазовых переходов в разбавленных магнитных полупроводниках.

## Литература

- [1] Morgunov R.B., Dmitriev A.I., Kazakova O. Phys. Rev. B. 2009. V. 80. P. 085205.
- [2] Morgunov R.B., Dmitriev A.I., Tanimoto Y., Kazakova O. // J. Appl. Phys. 2009. V. 105. P. 093922.
- [3] Дмитриев А.И., Моргунов Р.Б., Зайцев С.В. // ЖЭТФ. 2011. Т. 139. С. 367.

---

<sup>1</sup>Работа поддержана грантом Президента РФ МК-1764.2011.3.

# КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ РУТЕНИЯ, ПОЛУЧЕННЫХ В ОБРАТНОМИЦЕЛЛЯРНЫХ РАСТВОРАХ

<sup>\*2</sup> *Кузнецов М.А., <sup>2</sup>Сергеев М.О., <sup>2</sup>Антонов А.Ю.,*

<sup>1</sup> *Ревина А.А., <sup>2</sup>Боева О.А.*

<sup>1</sup> *ИФХЭ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

*\* mikhael.kuznetsov@gmail.com*

В данной работе рассмотрены получение, идентификация и характеристика наночастиц рутения, изучение их каталитических свойств в отношении реакций изотопного обмена в молекулярном водороде. Наночастицы Ru были получены в обратномичеселлярных растворах двумя методами: химическим (восстановитель – кверцетин) и радиационно-химическим ( $\gamma$ -излучение  $^{60}\text{Co}$ ) восстановлением ионов металлов в обратных мицеллах с различными коэффициентами солюбилизации [1]. Под коэффициентом солюбилизации понимается мольное отношение воды и ПАВ (АОТ), варьируя которое можно изменять размеры мицелл, и, соответственно, размеры получаемых наночастиц. Для доказательства образования, характеристики и контроля синтеза получаемых наночастиц применялись различные методы анализа: UV-VIS спектрофотометрия, атомно-силовая (АСМ) и просвечивающая электронная (ПЭМ) микроскопия, а также адсорбционные и каталитические исследования. Впервые получены наноконпозиты на основе наночастиц рутения, где в качестве носителя взят  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$  марки «Трилистник». Получены зависимости каталитической активности и энергии активации в отношении реакций изотопного обмена водорода от размера нанесенных частиц и их концентрации. Обнаружено, что активность наноразмерных частиц рутения сопоставима с активностью традиционных пропиточных рутениевых катализаторов и приближается к активности пленки рутения при низких температурах (77К). Полученные высокие значения удельной каталитической активности наночастиц рутения показывают перспективность их дальнейшего изучения.

## Литература

- [1] Ревина А.А., Кезиков А.Н., Алексеев А.В., Хайлова Е.Б., Володько В.В. Радиационно-химический синтез наночастиц металлов. // Нанотехника. 2005. № 4. С.105-111.

# «ЖИВАЯ» ТРЕХМЕРНАЯ РАДИКАЛЬНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ КАК СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОРАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИМЕРОВ

\* *Курочкин С.А., Махонина Л.И., Перепелицина Е.О.,  
Грачев В.П.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*oligo@icp.ac.ru*

Конструирование макромолекул с высокой степенью разветвления позволяет получать новые полимерные материалы, характеризующиеся более компактными размерами макромолекул и, как следствие, повышенными плотностью функциональных групп и совместимостью с другими полимерами и неорганическими добавками. Трехмерная радикальная полимеризация, обычно используемая для получения сетчатых полимеров, при создании специальных условий, регулирующих длину первичных полимерных цепей – элементарных строительных блоков макромолекул разветвленной архитектуры, позволяет синтезировать полимеры с заданной степенью разветвления (относительное количество разветвляющего мономера) без риска гелеобразования вплоть до полного исчерпания мономеров. Режим «живых» цепей является наиболее предпочтительным при радикальной полимеризации, поскольку образующиеся полимерные цепи имеют узкое молекулярно-массовое распределение ( $M_w/M_n = 1.1 - 1.3$ ) и контролируемый рост длины полимерной цепи осуществляется на протяжении всего процесса. Разработанная нами кинетическая теория образования высокоразветвленных полимеров методом «живой» трехмерной радикальной полимеризации и экспериментальные данные по синтезу разветвленных полимеров показывают, что полимерный продукт представляет собой смесь линейных, слаборазветвленных и высокоразветвленных макромолекул. Содержание высокоразветвленных макромолекул, состоящих не менее чем из семи первичных полимерных цепей, не превышает 30 мас.%, то есть более половины полимерного вещества является «балластом», не обладающим уникальными свойствами. Нами было предложено и экспериментально показано, что содержание высокоразветвленных макромолекул при радикальной полимеризации стирола и дивинилбензола в присутствии алкоксиамина как агента «живой» полимеризации ( $T = 120^\circ\text{C}$ ) можно повысить проведением процесса в среде осадителя, в частности н-бутанола.

# О МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДВИЖЕНИЯ ГАЗА В ПОРИСТЫХ СРЕДАХ С ОЧАГАМИ ГЕТЕРОГЕННОГО ГОРЕНИЯ<sup>1</sup>

*Луценко Н. А.*

*ИАПУ ДВО РАН, Владивосток, Россия*

*NickL@inbox.ru*

Предложена модель, описывающая процессы при гетерогенном горении пористых сред. Предполагается, что твердое пористое вещество состоит из горючего и инертного компонента, при этом твердое горючее вещество в результате реакции с газообразным окислителем превращается в газ. Модель строится в предположении взаимодействующих взаимопроникающих континуумов [1] с использованием классических подходов теории фильтрационного горения [2]. Для описания динамики газа используется уравнение сохранения импульса для пористых сред [1], которое является более корректным, чем классическое уравнение Дарси. В модели учитывается разница температур фаз, изменение объема и массы фаз при взаимодействии, наличие диффузии окислителя, зависимость вязкости газа от температуры. Процессы горения описываются одностадийной химической реакцией первого порядка. В качестве граничных условий задаются давление газа и условия теплообмена на входе и на выходе из пористого объекта, а также температура газа на входе в объект. Для исследования описываемых предложенной моделью процессов разработан оригинальный численный метод, основанный на комбинации явных и неявных конечно-разностных схем, и решен ряд тестовых задач.

## Литература

- [1] Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978. 336 с.
- [2] Алдушин А.П., Мержанов А.Г. Теория фильтрационного горения: общие представления и состояние исследований // Распространение тепловых волн в гетерогенных средах. Новосибирск: Наука, 1988. С. 9-52.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке Президента РФ (грант № МК-2198.2011.1), РФФИ (грант № 10-01-90004-Бел-а), ДВО РАН (проекты № 09-И-ОЭМПУ-04, № 09-И-П2-05, № 11-III-B-01И-011).

# НЕОБЫЧНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ФОТОФИЗИЧЕСКИХ И ФОТОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ 8-НИТРО-6-ЭТОКСИ-2,2,4-ТРИМЕТИЛ-1,2-ДИГИДРОХИНОЛИНА ОТ ДЛИНЫ ВОЛНЫ ВОЗБУЖДЕНИЯ

*\* Лыго О.Н., Тимохина Е.Н., Некипелова Т.Д.*

*ИБХФ РАН, Москва, Россия*

*\* [lygo@sky.chph.ras.ru](mailto:lygo@sky.chph.ras.ru)*

Изучение фото- и термochromeных свойств органических красителей является актуальной проблемой в связи с созданием различных фоточувствительных устройств. При этом важным свойством является различный отклик системы в зависимости от длины волны возбуждения. Исследование фотофизических и фотохимических свойств 8-нитро-6-этокси-2,2,4-триметил-1,2-дигидрохинолина (ДГХ) показало различное поведение этого соединения при фотовозбуждении длинноволновой и коротковолновой полос поглощения. Методами стационарного и импульсного фотолиза исследованы спектрально-кинетические характеристики интермедиатов, образующихся при облучении ДГХ в различных растворителях (гептан, ацетонитрил, метанол, этанол). Возбужденное состояние, образующееся при облучении коротковолновой полосы поглощения (290–350 нм), не активно в фотохимической реакции и дезактивируется без образования интермедиатов путем флуоресценции и внутренней конверсии. Флуоресценция отсутствует при фотовозбуждении длинноволновой полосы поглощения (> 450 нм). Обнаружена обратимая фотохимическая реакция при возбуждении этой полосы поглощения и охарактеризованы спектрально-кинетические характеристики трех промежуточных частиц, наблюдаемых при фотолизе (максимумы поглощения 390, 400 и 420 нм и времена жизни 10, 2, 0.5 мс соответственно). Спектры поглощения и константы скорости гибели промежуточных частиц практически не зависят от полярности среды и наличия кислорода в системе. Предложен механизм обратимой фотохимической реакции, который состоит в раскрытии гетероцикла по связи N-C(2) при фотовозбуждении длинноволновой полосы поглощения и темновой обратной реакции. Первичный продукт раскрытия гетероцикла по связи N-C(2) образующийся в конфигурации *cisoid-cis* может переходить в конфигурации *transoid-cis* и *cisoid-trans*. Квантовохимические расчёты показывают, что в первичном продукте может также происходить перегруппировка с отрывом атома водорода от метильной группы C(2)Me или от C(3)H атомов гетероцикла. Энергетический барьер этих реакций составляет 64.83 и 94.80 ккал/моль соответственно. Необычный отклик, наблюдаемый при фотовозбуждении ДГХ обсуждается на основании особенностей строения ДГХ.



## СЕЛЕКТИВНЫЙ ОКСИКРЕКИНГ ТЯЖЕЛЫХ КОМПОНЕНТОВ ПОПУТНОГО ГАЗА

*\* Магомедов Р.Н., Прошина А.Ю.*

*ИХФ РАН, Москва, Россия*

*\*tetrationat@rambler.ru*

Одна из наиболее острых проблем отечественной нефтегазовой отрасли – недопустимо высокий объем сжигаемых на факелах попутных газов. По некоторым оценкам, он достигает 50 млрд. куб. м, т.е. 10% отечественной добычи природного газа. Обсуждается несколько направлений утилизации ПНГ, но наиболее реальное – производство тепло- и электроэнергетики для удовлетворения собственных нужд нефте- и газопромислов и прилегающих регионов. Однако сырые природные и попутные газы непригодны для прямого использования во многих типах современных энергоустановок, особенно на базе газопоршневых двигателей, из-за присутствия в них тяжелых фракций углеводородов  $C_{5+}$ . Наличие в газовой смеси даже незначительной, более 1-2% об. примеси углеводородов  $C_{5+}$ , имеющих низкие октановые числа, приводит к появлению стука (детонации) в двигателе и не позволяет достигать его номинальной мощности. Кроме того, увеличивается образование нагара и износ частей двигателя, что снижает его ресурс. В работе показана принципиальная возможность селективного окислительного крекинга тяжелых компонентов попутного газа (пентана, гексана, гептана) в более легкие и высокооктановые соединения, пригодные для питания энергоустановок современного типа. Основными продуктами процесса являются метан, этан, этилен, водород, а также незначительные количества углекислого газа и пропилена. В ходе проведенных исследований определены условия (температура, время контакта, процентное содержание кислорода), при которых достигается практически полная конверсия указанных компонентов смеси. Достоинствами предложенного метода селективного окислительного крекинга являются: технологическая простота, возможность проведения процесса в автотермическом режиме, отсутствие сажеобразования, незначительные потери энергосодержания исходного газа и отсутствие требующих утилизации побочных продуктов. Результаты лабораторных исследований были подтверждены пилотными испытаниями.

# ОПИСАНИЕ РАЗЛИЧНЫМИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ ПЕРВИЧНОЙ СТАДИИ ОЗОНОЛИЗА ЭТИЛЕНА И ТЕТРАФТОРЭТИЛЕНА

<sup>1</sup> *Майоров А.В.*, <sup>2</sup> *Крисюк Б.Э.*, \*<sup>1</sup> *Попов А.А.*

<sup>1</sup> *ИБХФ РАН, Москва, Россия*, <sup>2</sup> *ИПХФ РАН, Черногоровка, Россия*  
\* *hruk@list.ru*

Методами квантовой химии (MP2, QCISD, CCSD, MRMP2 и различными методами теории функционала плотности PBE0, OPTX, CPW91, V3PW91, OLYP, V3LYP, BLYP) исследован механизм первичной стадии реакции озона с двойной связью этилена и тетрафторэтилена. Изучены кинетические закономерности двух каналов реакции – согласованное присоединение через симметричное переходное состояние (механизм Криге) и несогласованное присоединение через бирадикальное переходное состояние (механизм Демура). Используемые методы дают результаты, иногда не соответствующие экспериментальным данным. Оба эти механизма удалось удачно описать в однодетерминантном приближении методами QCISD, CCSD, V3LYP, PBE0 и в многодетерминантном приближении методом MRMP2. Эти расчеты подтвердили наличие обоих каналов реакции для этилена и тетрафторэтилена, дали разумные величины для констант скорости и соотношения каналов реакции. Показано, что реакция озонлиза этилена протекает по механизму согласованного присоединения существенно быстрее, а озонлиз тетрафторэтилена идет по пути несогласованного присоединения.

# СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В АЛЮМИНИЕВОМ СПЛАВЕ В95 В УСЛОВИЯХ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ<sup>1</sup>

<sup>\*2</sup>*Насонов П.А.,* <sup>1</sup>*Ширинкина И.Г.,* <sup>1</sup>*Петрова А.Н.,*  
<sup>1</sup>*Бродова И.Г.,* <sup>2</sup>*Шорохов Е.В.*

<sup>1</sup>*ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия,* <sup>2</sup>*РФЯЦ-ВНИИТФ,*  
*Снежинск, Россия*  
*\*nasonovpoul@list.ru*

В работе проведено сравнение структуры, механических и термодинамических характеристик сплава В95 в отожженном состоянии после горячего прессования и деформированным динамическим канально-угловым прессованием (ДКУП). Деформация ДКУП происходила со скоростью  $10^4 - 10^5 \text{ с}^{-1}$ , в области с пересекающимися под углом  $90^\circ$  каналами. Образец двигался через каналы за счет постоянно действующего на поршень давления пороховых газов со скоростью 120-150 м  $\text{с}^{-1}$ . Данные способы обработки позволили варьировать дисперсность структурных параметров. В частности, после горячего прессования в сплаве сформировалась типичная субзернистая структура с размером 2 мкм, а уже после первого цикла ДКУП – ультрамелкокристаллическая (УМК) структура со средним размером кристаллитов, разделенных большеугловыми границами, 200-250 нм. После второго цикла ДКУП растет доля кристаллитов размером менее 100 нм. Результаты квазистатических испытаний на разрыв при скорости деформации  $10^{-3} \text{ с}^{-1}$  показали, что предел прочности для УМК образцов возрастает на 25%, предел текучести в 2,4 раза, пластичность уменьшилась с 40% до 13% по сравнению с крупнокристаллическим. Для изучения механических и термодинамических свойств образцов после ДКУП были выполнены динамические испытания на сжатие на установке РГС-25, реализующей метод Кольского при скорости деформации  $5 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ . Механические свойства УМК и крупнокристаллического образца, определенные при динамическом сжатии, различаются очень незначительно. Также установлено, что доля диссипированной энергии у УМК образца после двух циклов ДКУП увеличивается в 2,5 раза по сравнению с крупнокристаллическим. Авторы выражают благодарность сотрудникам лаборатории Физических основ прочности Института механики сплошных сред УрО РАН за проведение динамических испытаний.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий и физика сильно сжатого вещества» и проекта РФФИ №08-00-0106.

# ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ИТТЕРБИЙ-ЭРБИЕВОЙ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОЙ СТЕКЛОКЕРАМИКИ ПРИ НИЗКОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

*Некрасова Я.А., Никоноров Н.В., \*Асеев В.А.,  
Колобкова Е.В.*

*СПбГУ ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*

*\*Aseev@oi.ifmo.ru*

Перспективным люминофором для создания энергоэффективных источников белого света являются материалы, активированные эрбием. Однако необходимо оптимизировать параметры стеклокерамик по размеру и объему кристаллической фазы в структуре материала [1]. Целью данной работы являлось исследование люминесцентных свойств наноструктурированной стеклокерамики, активированной ионами иттербия и эрбия, при комнатной температуре (300 К) и температуре жидкого азота (77 К). В работе использовались образцы следующего состава:  $30\text{SiO}_2\text{-}18\text{PbF}_2\text{-}7,5\text{Al}_2\text{O}_3\text{-}5\text{ZnF}_2\text{-}29\text{CdF}_2\text{-}3\text{YF}_3$ , концентрация иттербия составляла 3 мол%, концентрация  $\text{ErF}_3$  изменялась от 0,05 до 0,5 мол%. Термообработка проводилась при температуре  $515^\circ\text{C}$ , время отжига варьировалось от 30 до 600 мин. Измерения спектров люминесценции проводились в диапазонах (400-700 нм) и (1450-1650 нм) при температурах 300 и 77 К. Возбуждение люминесценции осуществлялось с помощью диодного лазера (975 нм). Данные рентгенофазового анализа позволяют сделать следующие выводы: при термообработке свинцово-фторидных стекол, выделяется кристаллическая фаза – кубическая, гранецентрированная, пространственная группа  $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$ . Размеры элементарной ячейки в случае фторида эрбия составляют 5,725 Å и для фторида иттербия – 5,7 Å. В зависимости от времени термообработки размер выделяющейся кристаллической фазы составил от 16 нм (2 ч) до 40 нм (10 ч). В ходе работы было исследовано влияние концентрации ионов эрбия, времени вторичной термообработки и мощности возбуждающего излучения на спектры люминесценции.

## Литература

- [1] Асеев В.А., Голубков В.В., Клементьева А.В., Колобкова Е.В., Никоноров Н.В. // Спектрально-люминесцентные свойства прозрачной свинцовофторидной наностеклокерамики, активированной ионами эрбия. Оптика и спектроскопия. 2009. Т.106. №5. С. 770-775.

# МОДИФИЦИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ПЛЕНКИ ПТФЭ В ТЛЕЮЩЕМ РАЗРЯДЕ ПОСТОЯННОГО ТОКА<sup>1</sup>

*Пискарев М.С., Яблоков М.Ю., \*Гильман А.Б.,  
Кузнецов А.А.*

*ИСПМ РАН, Москва, РФ*

*\*plasma@ispm.ru*

Политетрафторэтилен (ПТФЭ) обладает высокими диэлектрическими характеристиками, низким коэффициентом трения, термо- и химической стойкостью, однако из-за низкой поверхностной энергии полимера для ряда применений требуется модифицирование его поверхности. Целью настоящей работы является разработка эффективного метода модифицирования поверхности пленок ПТФЭ с использованием низкотемпературной плазмы. В качестве подхода для решения задачи использовали обработку пленок в тлеющем разряде постоянного тока на аноде и катоде, разделяя эффект воздействия отрицательно и положительно заряженных компонентов плазмы. Установлено, что обработка в разряде постоянного тока приводит к существенному увеличению поверхностной энергии ( $\gamma$ ) пленки, в том числе, к многократному возрастанию ее полярного компонента ( $\gamma^p$ ), уменьшению величины контактного угла смачивания ( $\theta$ ) и значительному улучшению адгезионных характеристик. Наилучший эффект достигается при обработке пленок на аноде в течение 60 с при плотности тока 0.2 мА/см<sup>2</sup> и давлении в камере 13 Па:  $\theta$  уменьшается от 120° до 33°,  $\gamma$  возрастает от 13.2 до 61.5 мДж/м<sup>2</sup>, а  $\gamma^p$  увеличивается от 0.03 до 42.0 мДж/м<sup>2</sup>. С помощью метода РФЭС показано, что в результате воздействия разряда в поверхностном слое полимера наблюдается уменьшение содержания фтора и образование значительного количества кислородосодержащих групп. Методом динамического конденсатора установлено, что уменьшение величины  $\theta$  сопровождается увеличением плотности поверхностного заряда от -30 В для исходного ПТФЭ до -100 В для ПТФЭ, обработанного на аноде. Показано, что при хранении обработанных в плазме пленок на воздухе при комнатных условиях  $\theta$  постепенно возрастает, однако даже через 3 месяца величина  $\theta$  остается < 50°. При нагревании пленок выше 120°С в течение 30 мин величина  $\theta$  увеличивается до 90°. Предполагается, что такого рода изменения связаны с термодинамической релаксацией макромолекул в поверхностном слое полимера.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН № 7 "Разработка методов получения химических веществ и создание новых материалов" и Гранта Президента РФ по поддержке ведущих научных школ ИПШ — 4371.2010.3.

# ПЕРВИЧНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ФОТОХИМИИ Fe(III)-КАРБОКСИЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ<sup>1</sup>

<sup>\*2</sup> *Поздняков И.П.*, <sup>2</sup> *Плюснин В.Ф.*, <sup>2</sup> *Глебов Е.М.*,  
<sup>2</sup> *Гривин В.П.*, <sup>1</sup> *Мельников А.А.*, <sup>1</sup> *Компанец В.О.*,  
<sup>1</sup> *Чекалин С.В.*

<sup>1</sup> *ИС РАН, Троицк, Московская область, Россия*, <sup>2</sup> *ИХКГ СО РАН,  
Новосибирск, Россия*

*\* pozdnyak@kinetics.nsc.ru*

Считается, что инициированные солнечным светом фотохимические реакции комплексов Fe(III) с простыми карбоновыми кислотами влияют на многие железо-зависимые биогеохимические процессы и отвечают за фотохимическую продукцию CO и CO<sub>2</sub>, поглощение кислорода и генерацию активных соединений кислорода (•OH, HO<sub>2</sub>•, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) в атмосфере и природных водах. Однако, предлагаемые в литературе механизмы фотолитиза таких комплексов Fe(III) были основаны преимущественно на анализе конечных продуктов фотореакций. В докладе представлены данные об исследовании механизмов фотолитиза ряда экологически значимых природных Fe(III)-карбоксилатных комплексов (с винной, глиоксалевой, пировиноградной, щавелевой и молочной кислотами) методами стационарного и лазерного импульсного фотолитиза с нано- и фемтосекундным временным разрешением. Показано, что УФ-возбуждение карбоксилатных комплексов в полосу переноса заряда (ПЗЛМ) приводит к появлению короткоживущего (1 пс) возбужденного состояния, которое в результате внутрисферного переноса электрона трансформируется в долгоживущий (1-3 мс) радикальный комплекс Fe(II):



Определены основные спектрально-кинетические параметры (спектры поглощения, квантовые выходы, константы скорости реакций) для всех изученных радикальных комплексов. Показано, что основным каналом гибели радикальных комплексов является диссоциация на Fe(II) и соответствующий органический радикал. Таким образом, существующий в литературе механизм фотолитиза Fe(III)-карбоксилатных комплексов, предполагающий образование RCOO• радикала и иона Fe(II) в первичном фотохимическом акте, нуждается в существенном уточнении.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты №№ 09-03-00330, 11-03-00268) и Программы интеграционных проектов СО РАН 2009 – 2011 гг. (грант № 70).

# МЕМБРАНОТРОПНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИЗАМЕЩЕННЫХ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФУЛЛЕРЕНОВ<sup>1</sup>

*\* Полетаева Д.А., Корнев А.Б., Файнгольд И.И.,  
Хакина Е.А., Смолина А.В., Рыбкин А.Ю.,  
Котельникова Р.А., Богданов Г.Н., Трошин А.П.,  
Котельников А.И.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*daryazhokhova@gmail.com*

В работе изучались мембранотропные свойства полизамещенных водорастворимых производных фуллеренов C<sub>60</sub> и C<sub>70</sub> (ВПФ), синтезированных в ИПХФ РАН. Показано, что все ВПФ, не зависимо от присоединенных аддендов, являются тушителями фосфоресценции триплетных зондов эозина (в водных растворах и в составе фосфатидилхолиновых липосом) и пирена в составе липосом. По изменению кривой затухания аннигиляционной замедленной флуоресценции пирена, включенного в гидрофобные сайты мембраны, оценивали способность ВПФ встраиваться в липидный бислой липосом. Определяли константы скорости тушения замедленной флуоресценции пирена в присутствии ВПФ ( $K_{\text{пир}}$ ). Значения констант меняются в диапазоне от  $10^7$  до  $10^9 \text{ M}^{-1} \text{ c}^{-1}$ . Порядок констант соответствует диффузионным взаимодействиям ВПФ с зондом. По изменению констант скорости тушения фосфоресценции зонда эозина в водных растворах ( $K_{\text{эо}}$ ), и в области глицериновых остатков фосфолипидов мембран, оценивали характер взаимодействия ВПФ с мембраной в области полярных головок липидов. Показано, что значения констант скорости тушения фосфоресценции варьируются в диапазоне от  $10^6$  до  $10^9 \text{ M}^{-1} \text{ c}^{-1}$ . Соединения НК-205 и НК-212 имели самые низкие значения констант скорости тушения (в водных растворах и в составе липосом) ( $2 \cdot 10^6$  и  $10^6 \text{ M}^{-1} \text{ c}^{-1}$ , соответственно). Возможно, этот результат объясняется отрицательным зарядом на их фуллереновом ядре, что резко снижает вероятность диффузионных столкновений ВПФ с отрицательно заряженным эозином. Эффективные константы скорости тушения замедленной флуоресценции пирена фуллереновыми производными примерно на порядок выше, чем константы скорости тушения фосфоресценции эозина в структуре мембраны. Этот результат свидетельствует о способности ВПФ эффективно взаимодействовать с липосомальной мембраной: локализовываться на ее поверхности и проникать в гидрофобные сайты липидного бислоя.

---

<sup>1</sup>Исследования поддержаны Программой Президиума РАН № 22 и грантом РФФИ 10-03-00687.

# МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПП И НАНОРАЗМЕРНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАПОЛНИТЕЛЕЙ. ПОЛУЧЕНИЕ МЕТОДОМ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ IN SITU И СВОЙСТВА<sup>1</sup>

<sup>4</sup>Польщиков С.В., <sup>\*4</sup>Недорезова П.М., <sup>4</sup>Клямкина А.Н.,  
<sup>4</sup>Аладышев А.М., <sup>1</sup>Щеголихин А.Н., <sup>3</sup>Шевченко В.Г.,  
<sup>4</sup>Крашенинников В.Г., <sup>1</sup>Монахова Т.В., <sup>2</sup>Мурадян В.Е.  
<sup>1</sup>ИБХФ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия,  
<sup>3</sup>ИСПМ РАН, Москва, Россия, <sup>4</sup>ИХФ РАН, Москва, Россия  
\*sid\_06@bk.ru

Разработана методика и определены оптимальные условия получения композиционных материалов на основе изотактического полипропилена и наноуглеродных наполнителей (графеновых нанопластин и многостенных углеродных нанотрубок) методом полимеризации in situ в среде жидкого пропилена с использованием металлокомплексных каталитических систем. Графеновые нанопластины получали по методике, в основе которой лежит химическое окисление графита и его последующее восстановление, и согласно результатам спектроскопии КР они состоят в среднем из 3 - 5 слоев графена. Проведено исследование микроструктуры и комплекса физико-механических, электро- и теплофизических свойств композиционных материалов. Показано, что при введении 0.2–1.5 %об. наноапполнителей достигается увеличение модуля упругости на 20 - 30% по сравнению с матричным полимером. Сравнительный анализ изотактического ПП и композитов на его основе при испытании методом Hot Wire Ignition показал, что время индукции воспламенения композитов существенно увеличивается по сравнению с чистым полимером. Для всех синтезированных композитов при введении углеродных наполнителей в ПП наблюдается рост скорости и температуры кристаллизации полимеров (на 15 – 20<sup>0</sup>С), что обусловлено увеличением числа центров кристаллизации, приводящим к формированию мелкокристаллической структуры полимера. Установлено, что значение порога протекания, при котором композиты обладают заметным уровнем электропроводности составляет 2-3 об.%, Композиционные материалы характеризуются высокими диэлектрическими потерями в области СВЧ, также отмечается значительный рост диэлектрической проницаемости.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН № 21.



## СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ МЕТОДОМ УФ ЛАЗЕРНОГО ФОТОЛИЗА ПЕНТАКАРБОНИЛА ЖЕЛЕЗА

*\* Приемченко К.Ю., Гуренцов Е.В.*

*ОИВТ РАН, Москва, Россия*

*\*priemchenko@gmail.com*

Металлические наночастицы имеют широкий спектр потенциальных приложений в различных областях (катализ химических процессов, выращивание углеродных нанотрубок, наполнители магнитных жидкостей [1] и других). Одним из эффективных методов синтеза наночастиц является УФ лазерный фотолиз, при котором энергия излучения направлена на разрушение выделенных связей в молекулах прекурсора [2]. В данной работе получены новые экспериментальные данные по росту оптической плотности конденсированной фазы и росту размеров железных наночастиц в процессе их формирования при помощи методов лазерной экстинкции и лазерно-индуцированной инкаандесценции соответственно. Процесс формирования железных наночастиц в исследованных условиях можно разделить на три стадии: нуклеация и быстрый поверхностный рост малых кластеров до 1 нм (70 атомов) за время 1-2 мкс; дальнейший поверхностный рост и коагуляция кластеров до 2-3 нм и коагуляция больших наночастиц до 5-12 нм. Результаты измерений размеров наночастиц, полученных методом лазерно-индуцированной инкаандесценции на больших временах с начала их роста, хорошо согласуются с данными электронной микроскопии. Обнаружено изменение показателя преломления материала наночастиц с уменьшением их размеров. Сделан вывод о том, что род и давление газа-разбавителя оказывают существенное влияние на скорости роста и размеры наночастиц. Полученные результаты могут быть использованы для разработки технологий синтеза железных наночастиц заданного размера и апробации моделей конденсации сильно пересыщенных паров твердых веществ.

### Литература

- [1] Губин С.П., Кокшаров Ю.А., Хомутов Г.Б., Юрков Г.Ю. // Успехи химии 74 (6) 2005 С.539-574
- [2] Eremin A.V., Gurentsov E.V., Kock B., Schulz Ch. // Journal of Physics D, 2008. V.41, P.521-525.

# СЛОЖНАЯ СТРУКТУРА ВОЛНЫ ФИЛЬТРАЦИОННОГО ГОРЕНИЯ ТВЕРДОГО ТОПЛИВА<sup>1</sup>

*\*Салганский Е.А., Глазов С.В., Кислов В.М.,  
Салганская М.В.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*sea@icp.ac.ru*

При фильтрационном горении (ФГ) твердых топлив, когда направление газообразного окислителя совпадает с направлением движения фронта горения, возможна реализация различных тепловых структур волны горения. В случае, когда скорость распространения конвективной волны теплообмена меньше скорости фронта горения, топливо попадает в зону горения практически при начальной температуре и очень быстро достигает максимальной температуры. В зоне горения одновременно происходит сушка, пиролиз и окисление топлива. В случае, когда скорость распространения конвективной волны теплообмена больше скорости фронта горения, перед зоной окисления находится протяженная бескислородная высокотемпературная область, в которой вследствие различной температурной зависимости, происходит разделение зон химического превращения топлива в пространстве. Каждая стадия процесса проходит в своем температурном интервале и в своей пространственной области. Такая важная особенность ФГ твердых топлив позволяет эффективно проводить в одном процессе несколько различных последовательно протекающих процессов. Показано, что основные достоинства процесса газификации в сверхadiaбатических режимах (высокий энергетический КПД, приближающийся к 90%, возможность устойчивого проведения процесса при зольности топлива до 95% и влажности до 70%, резкое снижение образования токсичных продуктов, отсутствие органики в зольном остатке и т.д.) сохраняются при использовании пиролизующихся топлив. Появляется возможность в едином процессе (реакторе) осуществлять реакции: 1) окисления коксового остатка кислородом и парами воды; 2) пиролиза органического сырья без подвода энергии извне с получением жидких углеводородов и 3) сушку. Образование жидких продуктов может достигать 60% от веса органической части. Показанная в работе возможность осуществления в едином реакторе гаммы последовательно-параллельных процессов может найти широкое применение в различных областях химии и химической технологии.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при частичной поддержке гранта Президента РФ (МК-3125.2011.3), РФФИ (проект № 09-03-00623а) и программы № 3 Президиума РАН «Химические аспекты энергетики».

# ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КОМПЛЕКСОВ ЛАНТАНОИДОВ В РЕАКЦИЯХ С ОРГАНИЧЕСКИМИ ПЕРОКСИДАМИ<sup>1</sup>

*\* Сафаров Ф.Э., Казаков Д.В.*

*ИОХ УНЦ РАН, Уфа, Россия*

*\* farit\_safarov@mail.ru*

Комплексы лантаноидов используются в качестве структурных и люминесцентных проб и меток для изучения химических и биохимических процессов, а также широко применяются в качестве активаторов хемилюминесценции (ХЛ). В настоящей работе сообщается об обнаружении новых хемилюминесцентных реакций лантаноидов, в которых генерация возбужденных состояний происходит в результате взаимодействия комплексов металлов с реакционноспособными пероксидами. Обнаружен новый тип хемилюминесценции лантаноидов, возникающей в реакции диметилдиоксирана с рядом  $\beta$ -дикетонатных комплексов европия ( $\text{Eu}(\text{TТА})_3$ ,  $\text{Eu}(\text{FOD})_3$ ,  $\text{Eu}(\text{DPM})_3$ ,  $\text{Eu}(\text{TFC})_3$ ): возбуждение  $\text{Eu}(\text{III})$  происходит за счет энергии, выделяющейся при окислении диоксираном лигандов комплекса. Показано, что распад эндопероксида 1,4-диметилнафталина, нанесенного на поверхность силикагеля в присутствии  $\beta$ -дикетонатных комплексов лантаноидов  $\text{Nd}(\text{L}_3) \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Yb}(\text{L}_3) \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Eu}(\text{L}_3) \cdot n\text{H}_2\text{O}$  [L - ТТА, FOD, АА] сопровождается хемилюминесценцией в видимой и инфракрасной области спектра, эмиттером которой являются соответствующие комплексы металлов. Установлено, что ключевую роль в механизме ХЛ играет синглетный кислород, образующийся при разложении эндопероксида. Полученные результаты открывают принципиальную возможность создания хемилюминесцентной пробы на синглетный кислород, основанной на характерном свечении лантаноидов. Обнаружена новая яркая хемилюминесцентная твердофазная реакция: взаимодействие ацетона (газовая фаза) со смесью порошков пероксимоносulfата калия и гексагидрата нитрата европия, протекающая в комплексе  $\text{Eu}(\text{III})$ . Идентифицирован эмиттер свечения (возбужденный ион европия), определен выход ХЛ и предложен механизм реакции, согласно которому ключевую роль в хемилюминесценции играет образование диоксиранового интермедиа-та.

---

<sup>1</sup>Работа поддержана РФФИ (№09-03-00831а)

## О ВОЗМОЖНОСТИ ДЕТОНАЦИИ СМЕСЕЙ НА ОСНОВЕ НАНОКРЕМНИЯ<sup>1</sup>

<sup>2</sup>*Сафронов Н.Е.*, <sup>\*1</sup>*Долгобородов А.Ю.*, <sup>1</sup>*Махов М.Н.*,  
<sup>1</sup>*Стрелецкий А.Н.*

<sup>1</sup>*ИХФ РАН, Москва, Россия*, <sup>2</sup>*НИЯУ МИФИ, Москва, Россия*  
*\*aldol@chph.ras.ru*

Проведен комплекс экспериментальных работ по исследованиям конденсированных энергетических материалов на основе кремния и твердых окислителей для создания новых перспективных энергетических материалов с высокими скоростями самоподдерживающихся химических реакций в условиях горения и детонации. В ходе работы была отлажена методика, и исследованы различные режимы получения механоактивированных энергетических композитов (МАЭК) на основе смеси Si с твердыми окислителями: нитратом калия (НК), перхлоратами калия (ПХК) и аммония (ПХА). Исследовались процессы горения и перехода в детонацию (DDT) смесей Si/окислитель. Было получено, что составы на основе Si с размером частиц более микрометра горят со скоростями порядка 5-10 мм/с, в то время как МАЭК на основе наноразмерного nSi горят в режиме взрывного горения со скоростями более 100 м/с. При одинаковых условиях активации и постановки опытов составы nSi/НК реагируют в режиме взрывного горения без перехода в детонацию. Составы nSi/ПХК имеют длину перехода в детонацию от 7 см и более. Наименьшая длина перехода (2 см) и скорость детонации порядка 2 км/с получена для насыпных составов nSi/ПХА. Наиболее подробно исследован процесс DDT для МАЭК nSi/ПХА. Получены зависимости длины перехода от времени активации, материала оболочек и размера частиц композитов. При проведении опытов в дюралюминиевых трубках обнаружено интересное проявление процесса детонации, наблюдавшегося ранее для низкоплотных ВВ. Результаты, полученные в работе, позволяют рассматривать МАЭК на основе нанокремния в качестве перспективных энергетических материалов широкого круга применения от иницилирующих составов с повышенными экологическими требованиями до составов для использования в микросистемных устройствах.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 09-03-00409) и программы Президиума РАН «Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий и физика сильно сжатого вещества».

# СИНТЕЗ КОЛЛОИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ МЕТОДОМ ГИДРОЛИЗА ТЕТРАЭТОКСИСИЛАНА В ПРИСУТСТВИИ L-АРГИНИНА<sup>1</sup>

*\* Сухинина Н.С., Масалов В.М.*

*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*suhinina@issp.ac.ru*

Метод синтеза коллоидных частиц диоксида кремния основан на гетерогенной реакции гидролиза тетраэтоксисилана (ТЭОС) в присутствии аминокислот [1]. При исследовании влияния параметров синтеза наночастиц диоксида кремния методом гетерогенного гидролиза в присутствии аминокислоты (L-аргинина) установлено, что с увеличением интенсивности перемешивания реакционной смеси (ламинарный, турбулентный и эмульсионный режимы) скорость реакции гидролиза возрастает, а средний размер частиц и разброс по размерам уменьшаются. В работе представлены результаты исследований кинетики гидролиза тетраэтоксисилана. Установлены зависимости скорости химической реакции от температуры и концентрации L-аргинина. На начальном этапе скорость реакции постоянна во времени и не зависит от концентрации реагирующих веществ. Гетерогенный гидролиз ТЭОС представляет собой процесс, соответствующий химической реакции нулевого порядка. Определена энергия активации гидролиза ТЭОС и её зависимость от концентрации L-аргинина. В диапазоне концентраций L-аргинина 6 - 150 мМ, энергия активации уменьшается от 21,4 до 13,9 кДж/моль. При использовании полученных частиц в качестве затравок в ходе дальнейшего многостадийного их разрачивания с использованием метода Штобера были получены микрочастицы диаметром до нескольких сотен нанометров.

## Литература

- [1] T. Yokoi, Y. Sakomoto, O. Terasaki, Y. Kubota, T. Okubo, T. Tatsumi. J. Am. Chem. Soc. 128, 13664 (2006)

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 11-02-01348).

# СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА «КЛАССИЧЕСКИХ» КРИСТАЛЛОВ И ПРОБЛЕМА ИХ УСТОЙЧИВОСТИ

*\* Тарасевич Д.В., Бондарев В.Н.*

*НИИ физики ОНУ им. И. И. Мечникова, Одесса, Украина*

*\*dasha\_tar@ukr.net*

Построение последовательной статистической теории «классических» (не обладающих заметными квантовыми свойствами) кристаллов представляет собой существенную проблему химической физики, а также может иметь важное прикладное значение. Ранее, исходя из нелинейных уравнений для корреляционных функций кристалла [1], удалось дать количественное описание ряда принципиальных свойств кристаллов благородных газов [2, 3] (включая изотопические эффекты, а также квантовый вклад в явление сублимации Ne). В работе [4] мы рассчитали область термодинамической устойчивости реальной ГЦК фазы кристаллов типа Ar. Расчет показал, что граница устойчивости (линия спинодали) ГЦК фазы проходит в области тех давлений и температур, где экспериментально зафиксирован полиморфный переход в реальных Kr и Xe. Кроме того, в настоящем сообщении мы представляем результаты расчета [5] возможной линии спинодали гипотетической ОЦК фазы таких кристаллов. То, что эта линия целиком попадает в область устойчивости реальной ГЦК фазы кристаллов типа Ar, делает крайне маловероятным предсказание, сделанное ранее группой авторов относительно существования «острова стабильности» ОЦК Xe при высоких давлениях и температурах (результаты этой группы уже вызывали критику в литературе). Наконец, учет квантовых вкладов в свободную энергию кристалла позволил нам дать количественное предсказание границ термодинамической устойчивости ГЦК Ne [5], экспериментальное определение которых представляет принципиальный интерес.

## Литература

- [1] Bondarev V.N.//Phys. Rev. E 2005. V. 71. 051102.
- [2] Бондарев В.Н., Тарасевич Д.В.//ФТТ 2007. Т. 49. С. 131.
- [3] Бондарев В.Н., Тарасевич Д.В.//ФТТ 2008. Т. 50. С. 1281.
- [4] Бондарев В.Н., Тарасевич Д.В.//ФТТ 2010. Т. 52. С. 1156.
- [5] Бондарев В.Н., Тарасевич Д.В.//ФНТ (принята к печати в 2011).

# АКТИВАЦИЯ ФЕНОКСИИМИННЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ТИТАНА И ЦИРКОНИЯ МЕТИЛАЛЮМОКСАНАМИ С РАЗНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ТРИМЕТИЛАЛЮМИНИЯ В ОТСУТСТВИЕ МОНОМЕРА И РЕАКЦИЯХ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ ГЕКСЕНА-1<sup>1</sup>

\*<sup>1</sup>*Файнгольд Е.Е.*, <sup>1</sup>*Бравая Н.М.*, <sup>1</sup>*Петрова Л.А.*,  
<sup>1</sup>*Махаев В.Д.*, <sup>2</sup>*Гагиева С.Ч.*, <sup>2</sup>*Тускаев В.А.*, <sup>2</sup>*Булычев Б.М.*  
<sup>1</sup>*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*, <sup>2</sup>*МГУ им. М.В. Ломоносова,*  
*Москва, Россия*  
*\* fevgeny@mail.ru*

Феноксииминные комплексы титана и циркония, активированные метилалюмоксаном (МАО), - эффективные катализаторы полимеризации олефинов. Достоинствами катализаторов является их низкая стоимость, простота синтеза и сопоставимая с металлоценовыми системами активность в полимеризации этилена. Ранее нами было показано, что триметилалюминий (ТМА), содержащийся в МАО, уменьшает молекулярную массу формируемого полиэтилена. Сделано предположение об участии ТМА в реакциях каталитического превращения мономера. В работе приведены результаты <sup>1</sup>H ЯМР исследования продуктов активации бис[N-(3,5-дитретбутилсалицилиден)-2,3,5,6- тетрафторанилино]M (IV) (M = Ti, Zr) дихлоридов МАО с варьируемым содержанием ТМА (5-30 мол. %) в присутствии и отсутствии гексена-1, а также каталитического превращения гексена-1. В реакциях дихлоридных комплексов Ti и Zr с МАО обнаружено формирование катионных интермедиатов  $L_2Ti^+Me \dots XMAO^-$  (X=Cl или Me) и  $L_2Zr^+(\mu-Me)_2AlMe_2 \dots XMAO^-$ , и продукта обменной реакции комплексов с ТМА  $LAlMe_2$ . Показано, что исходные комплексы более реакционноспособны в обменных процессах, чем катионные интермедиаты. В присутствии гексена-1 активация комплексов МАО приводит к формированию каталитически активных центров:  $L_2Ti^+Y \dots XMAO^-$  (X=Cl или Me, Y = H или  $\eta^3$ -гексенил) и  $L_2Zr^+Pol \dots XMAO^-$ . Введение мономера стабилизирует каталитические системы и препятствует их разложению ТМА. Титановый катализатор изомеризует гексен-1 в гексен-2. ТМА подавляет этот процесс. Циркониевая каталитическая система эффективно полимеризует гексен-1.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 10-03-00926-а) и Роснауки (ГК № 02.740.11.0646).

# ГИБРИДНЫЕ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ ФУЛЛЕРЕНА C<sub>60</sub> В БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ХИМИОТЕРАПИИ<sup>1</sup>

<sup>\*2</sup> Файнгольд И.И., <sup>2</sup> Котельникова Р.А., <sup>2</sup> Коновалова Н.П.,  
<sup>2</sup> Мищенко Д.В., <sup>2</sup> Фрог Е.С., <sup>2</sup> Полетаева Д.А.,  
<sup>2</sup> Богданов Г.Н., <sup>2</sup> Котельников А.И., <sup>1</sup> Романова В.С.

<sup>1</sup> ИНЭОС РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup> ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия  
\*ifaingold@mail.ru

В настоящее время особый интерес вызывают исследования по функционализации аллотропных углеродных наноматериалов, направленные на получение новых гибридных структур, в которых фуллерены выполняют роль мембранотропных стереоспецифических носителей группировок с заданными антиоксидантными, цитостатическими и хемосенсибилизирующими свойствами. В работе изучены молекулярные механизмы биологического действия и противоопухолевая активность водорастворимых гибридных структур на основе фуллерена C<sub>60</sub> (ГСФ): фуллеренилпролина, фуллеренилпролинмононитрата и фуллеренилпролиндинитрата. С помощью метода триплетных зондов показано, что ГСФ выступают тушителями фосфоресценции триплетных зондов в водных растворах и в составе фосфатидилхолиновых липосом, определены константы скорости тушения фосфоресценции зондов. По изменению интенсивности свечения триплетного возбужденного состояния эритрозина, выявлена способность ГСФ проникать через липидный бислой во внутренний объем липосом. Впервые изучено влияние ГСФ на каталитическую активность важнейших митохондриальных ферментов: цитохром-с оксидазы и моноаминоксидазы. Показано, что ГСФ ингибируют каталитическую активность ферментов, причем эффективность действия зависит от числа NO<sub>2</sub> групп, включенных в структуру соединения. Исследованы механизмы антиоксидантного действия ГСФ. На трех различных штаммах экспериментальных опухолей исследована противоопухолевая активность соединений. Установлено, что ГСФ являются эффективными хемосенсибилизаторами для клинических противоопухолевых цитостатиков: циклофосфамида (на модели лейкемии Р-388 и аденокарциномы молочной железы) и адриамицина (на модели метастазирующей карциномы легких Льюис). Результаты работы вносят существенный вклад в решение фундаментальной задачи создания высокоэффективных лекарственных соединений на основе гибридных наноструктур.

---

<sup>1</sup> Исследования поддержаны Программой Президиума РАН № 22 и грантом РФФИ 10-03-00687.



## ЭЛЕКТРОЛИТЫ НА ОСНОВЕ СВЕРХРАЗВЕТВЛЕННОГО ПОЛИМЕРА ДЛЯ ЭЛЕКТРОХРОМНЫХ УСТРОЙСТВ

*\*Хатмуллина К.Г., Ярмоленко О.В., Батурина А.А.,  
Грачев В.П., Ефимов О.Н.  
ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия  
\*khatmullina\_k@mail.ru*

Были синтезированы и изучены новые полимерные гель-электролиты (ПГЭ) со сверхразветвленной матрицей для электрохромных устройств на основе полианилина. Сверхразветвленные полимеры являются перспективными для образования ПГЭ, потому что они полностью аморфны, хорошо растворимы и их сильноразветвленная структура может способствовать повышению ионной проводимости. ПГЭ синтезировали на основе тройного сополимера метилметакрилата (ММА), диметакрилата триэтиленгликоля и макромономера. Макрономер представляет собой сверхразветвленный сополимер метилметакрилата, метакриловой кислоты и диметакрилата этиленгликоля. Синтез полимерной части электролита вели *in situ* в системе, содержащей 70 и 80 мас.% 1М раствора  $\text{LiClO}_4$  в пропиленкарбонате, в присутствии радикального инициатора азобисизобутиронитрила. Ионную проводимость тонкопленочных ПГЭ изучали методом спектроскопии электрохимического импеданса. Импеданс измеряли в диапазоне частот от 350 кГц до 1 Гц при амплитуде сигнала переменного тока 100 мВ, используя импедансметр Z-350М фирмы Elns в ячейках с электродами из нержавеющей стали. Измерения проводили в температурном интервале от  $-20$  до  $50^\circ\text{C}$ . Рассчитывали энергии активации ионной проводимости. Найдено, что при максимальном содержании макромономера (20 мас.% в расчете на гель-электролит) система обладает самой высокой проводимостью из всех исследованных составов ( $8,8 \times 10^{-4}$  См/см при комнатной температуре) и ее энергия активации составляет 18,4 кДж/моль. При увеличении содержания ММА за счет снижения концентрации макромономера проводимость ПГЭ уменьшается. Видимо, макрономер существенно разрыхляет полимерную сетку, что способствует транспорту ионов лития в полимерной матрице гель-электролита. Что касается сшивающего агента - диметакрилата триэтиленгликоля, то изменение его концентрации вдвое (с 4 до 2 мас.%) практически не повлияло на проводимость.

# КИНЕТИКА СВЕРХБЫСТРОЙ ФОТОИНДУЦИРОВАННОЙ РЕКОМБИНАЦИИ ЗАРЯДОВ В ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫХ КОМПЛЕКСАХ В ПОЛЯРНЫХ РАСТВОРИТЕЛЯХ<sup>1</sup>

\* Юданов В.В., Иванов А.И., Михайлова В.А.

ВолГУ, Волгоград, Россия

\*yudanov-volsu@yandex.ru

В рамках многоканальной стохастической модели [1, 2] исследовано влияние полярности растворителей на кинетику сверхбыстрой рекомбинации зарядов в возбужденных донорно-акцепторных комплексах (ДАК). Основными энергетическими параметрами этой модели являются: свободная энергия рекомбинации зарядов  $\Delta G$ , энергии реорганизации среды  $E_{rm}$  и внутримолекулярных колебательных степеней свободы  $E_{rv}$ . Данные параметры были определены из фитинга экспериментальных данных для стационарного спектра полосы поглощения с переносом заряда. Частоты внутримолекулярных квантовых мод  $\Omega_\alpha$  и их параметры Хуанга-Риса  $S_\alpha$  были получены из данных резонансного комбинационного рассеяния [1]. Исследованы ДАКи: гексаметилбензол/тетрацианоэтилен (ТСНЕ), изодурен/ТСНЕ и пентаметилбензол/ТСНЕ в следующих полярных растворителях: ацетонитрил, валеронитрил и октанитрил. Полученные из фитинга значения величин  $E_{rm}$  и  $\Delta G$  сравнивались с предсказаниями простейшей континуальной теории диэлектриков. Показано, что влияние полярности среды на рассматриваемые параметры удовлетворительно описывается этой теорией. Проведено сравнение найденных кинетических параметров с экспериментальными данными [3].

## Литература

- [1] Feskov S.V., Ionkin V.N., Ivanov A.I., Hagemann H., Vauthey E. // Journal of Physical Chemistry A. 2008. V. 112. P. 594–601.
- [2] Feskov S.V., Ionkin V.N., Ivanov A.I. // Journal of Physical Chemistry A. 2006, v. 110. p. 11919–11925.
- [3] Nicolet O., Banerji N., Pages S., Vauthey E. // Journal of Physical Chemistry A. 2005. V. 109. P. 8236–8245.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (госконтракт 14.740.11.0374).

## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СИСТЕМЫ ГЕМИНАЛЬНОЕ ПАВ - ВОДОРАСТВОРИМЫЙ НЕИОННЫЙ ПОЛИМЕР

*\* Яцкевич Е.И., Мургородская А.Б., Захарова Л.Я.*

*ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань, Россия*

*\*katerina.yatzkevitch@yandex.ru*

Изучение и анализ агрегационного поведения и физико-химических свойств бинарных систем, содержащих полимеры и ПАВ, привлекает все большее внимание исследователей, так как они имеют высокий потенциал практического использования и в настоящее время находят широкое применение в современных технологиях, включая производство защитных покрытий, косметических средств, смазок, доставку лекарственных и диагностических средств. В данной работе комплексом физико-химических методов (тензиометрия, динамическое рассеяние света, оптическая спектрофотометрия) количественно охарактеризованы свойства супрамолекулярных систем на основе геминальных (дicationных) ПАВ и водорастворимых неионных полимеров. В качестве объектов исследования выбраны бромид гексалиден-бис-(диметилцетиламмония) (Гем-16), полиэтиленгликоли (с молекулярной массой 3000 и 20000 Да), блоксополимеры с различным соотношением пропиленоксидных и этиленоксидных фрагментов (Pluronic 31R1, Pluronic F-127, Synperonic L64). Установлены критические концентрации мицеллообразования, размеры агрегатов, поверхностный потенциал индивидуальных и смешанных систем. Проведено сравнение их мицеллообразующих свойств, солюбилизующей способности и каталитического эффекта в процессах щелочного гидролиза эфиров карбоновых кислот. Показано, что образование смешанных агрегатов ПАВ-полимер приводит к уменьшению положительного поверхностного потенциала мицелл геминального ПАВ и является одной из основных причин снижения мицеллярного каталитического эффекта в процессах гидролитического расщепления сложноэфирных связей.



# СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

ОБЩИЕ ПРОБЛЕМЫ  
ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ОКСИДА ГРАФЕНА С ОСНОВНЫМИ КРАСИТЕЛЯМИ

*\*Баскаков С.А., Шульга Ю.М., Кабачков Е.Н.,  
Смирнов В.А., Мартыненко В.М., Мурадян В.Е.,  
Баскакова Ю.В., Кресова Е.И.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*baskakov@icp.ac.ru*

В настоящее время наблюдается резкий всплеск внимания к оксиду графита. Это обусловлено открытием в 2004 году уникального по свойствам материала – графена. Отличительной особенностью оксида графита от других углеродных материалов является способность образовывать коллоидные растворы в воде и других полярных растворителях, где он распадается на тонкие листки оксида графена (ОГ). Гидрофильность ОГ обусловлена большим количеством кислородсодержащих функциональных групп (-COOH, -O-, -OH) в молекуле ОГ, что, как оказалось, позволяет легко окрашивать нанолитки ОГ основными красителями. Краситель удерживается на ОГ по тому же принципу, что и на природных и искусственных волокнах: за счет образования ионных связей между карбоксильными группами ОГ и аминогруппами красителя. В ИК- и УФ-спектрах окрашенного ОГ наблюдаются сдвиги полос поглощения красителя, что указывает на сильное поляризационное взаимодействие между ними.

Из преимуществ основных красителей следует отметить широкую цветовую гамму, исключительную яркость и чистоту оттенков, высокую красящую способность. Недостатки, ограничивающие их использование при крашении: низкая химическая и светостойкость. Действительно, Родамин Ж в водном растворе и в матрице ПММА быстро деградирует при действии УФ-света. Для суспензий окрашенных нанолитков ОГ и пленок ПММА, модифицированных ими, ситуация более сложная. При абсолютно одинаковых условиях облучения они становятся более темными, но окраска сохраняется. Видно, что потемнение пленки ПММА, модифицированной окрашенными частицами ОГ, соответствует подъему оптической плотности во всем диапазоне длин волн, кроме части диапазона, связанного с поглощением, определяющим цвет красителя. Установлено, что скорость фотодеструкции Родамина Ж нанесенного на ОГ в водных суспензиях снижается в 60 раз, в матрице ПММА – в 10 раз. Таким образом, открывается возможность использования окрашенных частиц ОГ в качестве пигментов, которые находят широкое применение для изготовления ЛКМ, окрашивания пластмасс, резин, синтетических волокон, пленок, бумаги и пр. Работа выполнена при поддержке программы ОХНМ №7.

# ОДНОПУЗЫРЬКОВАЯ СОНОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ГАЛОИДНЫХ СОЛЕЙ

*\*Гареев Б.М., Абдрахманов А.М., Шарипов Г.Л.*

*ИНК РАН, Уфа, Россия*

*\*ink@anrb.ru*

Однопузырьковая сонолюминесценция (ОПСЛ) - интенсивное свечение в жидкости, возникающее при быстром сжатии одиночного кавитационного пузырька. В чистой воде такой пузырек практически неподвижен. Однако, при большой концентрации соли пузырек совершает хаотические движения. Данный тип ОПСЛ получил в литературе собственное название moving-SBSL (M-SBSL), т.е. ОПСЛ движущегося пузырька. Такой режим описан в литературе для одиночного пузырька в некоторых органических жидкостях [1] и концентрированных кислотах [2]. В работе [3] изучено влияние концентрации соли и температуры на динамику движения пузырька и интенсивность ОПСЛ в водном растворе NaCl, при этом в спектрах ОПСЛ линии металла не были зафиксированы.

Нами получен подобный режим ОПСЛ для водных растворов NaCl с регистрацией линии металла и фотографий пузырька. Установлено, что при ОПСЛ в режиме движения в спектре появляется линия Na, но не всегда, а при определенных условиях. Анализ спектров и интенсивности свечения показал, что основными условиями попадания металла в пузырек являются: достаточная концентрация соли ( $C > 2$  моль/л), низкая температура от  $-10^0$  до  $0^0$  С, насыщение раствора инертным газом. При этих условиях пузырек начинает двигаться с резкими изменениями направления движения, что, скорее всего, и способствует попаданию микрокапель раствора, содержащих соль металла, внутрь пузырька.

Наблюдение атомарных линий свидетельствует о том, что электронное возбуждение металла связано с процессами в горячем газовом ядре кавитационного пузырька.

## Литература

- [1] Y. Didenko, W.B. McNamara III, K.S. Suslick. Nature, 2000, v. 407, p. 877.
- [2] D.J. Flannigan, K.S. Suslick. Phys. Rev. Lett., 2007, PRL 99, 134301.
- [3] W. Winiarczyk, K. Musiol. Optics Communications, 1999, 172 93-96.

# ОПЫТ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕЧЕНИЯ СЫПУЧИХ СРЕД МЕТОДОМ ДИСКРЕТНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ПОМОЩЬЮ ОТКРЫТЫХ ПРОГРАММНЫХ ПЛАТФОРМ YADE И PARAVIEW.

*Дорофеевко С.О.*  
*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*  
*dorofeenko@icp.ac.ru*

Сыпучая среда состоит из множества отдельных частиц, взаимодействующих посредством диссипативных контактных сил. Характерной особенностью такой системы является существенно нелинейная динамика и широкий спектр наблюдаемых в зависимости от условий нагружения явлений — твердоподобное состояние, «силовые цепочки», дилатансия, течение, гранулярный газ и др. Отсюда очевидна сложность макроскопического описания динамики сыпучих сред, обусловленная еще и тем, что для перехода от сыпучей среды к её макроскопическому описанию единственно параметров межчастичного взаимодействия недостаточно, необходимо также учитывать её локальную структуру.

Установить связь между взаимодействием на уровне частиц и их коллективным поведением позволяет метод дискретных элементов, заключающийся в расчете траектории каждой отдельной частицы. Но существенная вычислительная сложность метода требует применения продвинутых алгоритмов обнаружения столкновений, параллельных вычислений, современных технологий программирования. Важна также гибкость и расширяемость платформы как в плане моделей сил и геометрий, так и в плане форматов ввода/вывода и возможностей обработки результатов моделирования. Разработка подобной платформы — задача, требующая либо значительных ресурсов, либо длительной эволюции некоей элементарной реализации. Второй путь более характерен для свободного программного обеспечения — постепенное развитие от простого к сложному путем реализации независимыми участниками необходимых им возможностей в рамках общей платформы с определенной координацией вносимых изменений. Это не требует от отдельных участников весомых материальных затрат, но позволяет каждому получить более совершенный продукт за счет развитой базы и распределения децентрализованного объема текущей работы.

В докладе сообщается об опыте участия в разработке платформы для моделирования методом дискретных элементов на основе свободного программного обеспечения YADE и ParaView. Приводятся примеры моделирования течения сыпучих сред в различных условиях, в том числе, характерных для промышленных реакторов фильтрационного горения твердого топлива.



# ПОЛУЧЕНИЕ ВЫСОКОЧИСТОГО ВОДОРОДА ИЗ КОКСОВОГО ГАЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕМБРАН ИЗ СПЛАВА PdInRu

*\*<sup>1</sup>Лещинская К.В., <sup>1</sup>Рошан Н.Р., <sup>2</sup>Чистов Е.М.  
<sup>1</sup>ИМЕТ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>ИНХС РАН, Москва, Россия  
\*kirochka87@list.ru*

С увеличением объема производства выплавки чугуна и стали встает проблема утилизации отходящих газов этих производств. Например, при производстве 1 тонны стали получается 140 м<sup>3</sup> (н.у.) коксового газа, который в основном утилизируется сжиганием на ТЭЦ для получения тепла и электроэнергии.

Но в коксовом газе помимо CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub> содержится около 50 об.% H<sub>2</sub>, т.е. он представляет собой готовый продукт для извлечения высокочистого водорода с использованием мембран из специальных сплавов палладия - ценнейшего продукта для водородной энергетики.

Извлечение водорода из водородсодержащих газовых смесей с помощью мембран из сплавов палладия является единственным известным на сегодняшний день способом получения особо чистого водорода (99,999 об.%), реализуемым в одну стадию при наименьших эксплуатационных и капитальных затратах [1]. Состав газовых смесей существенно влияет на саму возможность извлекать высокочистый водород. Для каждой газовой смеси должен быть разработан свой состав сплава, обладающий высокой коррозионной стойкостью, высокими водородопроницаемостью, прочностью, пластичностью и низкой термомолекулярной дилатацией в водороде.

В данной работе проведены испытания по выделению высокочистого водорода на мембране из сплава Pd-6масс.% In-0.5 масс.% Ru из модельных смесей, близких по составу к коксовому газу. В результате эксперимента наблюдали устойчивое выделение водорода при постоянном сбросе остаточного газа, т.е. производительность мембраны не изменялась. После 100 часовой наработки удельная водородопроницаемость также осталась на первоначальном уровне. Мембрана была абсолютно герметична, что подтвердило её работоспособность в коксовом газе.

## Литература

- [1] Словецкий Д.И., Чистов Е.М., Рошан Н.Р., Производство чистого водорода, Международный научный журнал «Альтернативная энергетика и экология», 2004, №1 стр. 54-57.

# ВЛИЯНИЕ КАЛИБРОВОЧНЫХ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ПОЛЕЙ ГРАФЕНОВЫХ ЛЕНТ НА ЭВОЛЮЦИЮ ПРЕДЕЛЬНО КОРОТКОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИМПУЛЬСА

*\*Ляпкосова О.С., Лебедев Н.Г.*

*ВолГУ, Волгоград, Россия*

*\*lyapkosovaolga@mail.ru*

Как известно из литературы [1], одной из основных целей современной оптики является создание полностью оптических приборов, в которых с помощью света можно управлять светом. Свойства графеновых нанолент стимулировали их широкое изучение в рамках нелинейной оптики. Одним из перспективных направлений в этой области является изучение процесса распространения ультракоротких импульсов света (оптических солитонов) в графеновых лентах [2].

Графеновые ленты считаются идеальными, имеющими «arm-chair»-модификацию. Электромагнитное поле импульса описывается классическим на основании уравнений Максвелла. Эволюция ансамбля Ферми частиц описывается классическим кинетическим уравнением Больцмана в приближении времен релаксации.

В работе изучается влияние калибровочных полей, которые возникают в графеновых лентах под влиянием внешних линейных деформаций. Получено эффективное уравнение на вектор-потенциал электромагнитного импульса. Исследуемое уравнение решалось численно при помощи прямой разностной схемы типа «крест» [3]. Было проанализировано распространение ультракоротких оптических импульсов в деформированных графеновых лентах при разных значениях относительной деформации. Показан эффект выпрямления для ультракороткого электромагнитного импульса при его прохождении через деформированные графеновые ленты.

## Литература

- [1] Х. Гиббс. Оптическая бистабильность. Управление светом с помощью света. Мир, М. (1988). 520 с.
- [2] М.Б. Белоненко, Е.В. Демушкина, Н.Г. Лебедев. // Изв. РАН. Сер. физ. 72, 28 (2008).
- [3] Н.С. Бахвалов. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). Наука, (1975). 630 с.

## ВЛИЯНИЕ ЗАМЕСТИТЕЛЯ ПРИ ДВОЙНОЙ СВЯЗИ И ЕЕ ДЕФОРМАЦИИ НА РЕАКЦИЮ ОЗОНА С ЭТИЛЕНОМ

\*<sup>1</sup> *Мамин Э.А.*, <sup>2</sup> *Крисяк Б.Э.*, <sup>1</sup> *Майоров А.В.*, <sup>1</sup> *Попов А.А.*  
<sup>1</sup> *ИБХФ РАН, Москва, Россия*, <sup>2</sup> *ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*  
\*yeldar443@mail.ru

Реакция присоединения озона к двойной связи широко распространена, давно используется в технике, например для исследования состава каучуков. Эта реакция важна в экологии, в частности является эффективным каналом распада продуктоов сгорания, сажи. Несмотря на это, до сих пор нет детального понимания механизма этой реакции. В литературе обсуждались разные механизмы протекания - согласованное присоединение (Криге) и несогласованное (Демур). Первичным продуктом является молозонид; он неустойчив и быстро распадается на спектр других продуктоов, поэтому анализ механизма по продуктам реакции затруднен.

Цель данной работы – исследовать влияние деформации двойной связи на реакцию озона с 1-хлорэтиленом. Для расчета выбраны многоконфигурационные методы с поправками 2-го порядка теории возмущений, а также гибридный метод функционала плотности. Использовали набор базисных функций 6-31+G\*\*, программы GAUSSIAN-03, US GAMESS, PC GAMESS.

Деформируемая связь C=C в задачах на поиск минимума (в случае реагента  $C_2H_3Cl$ ) и поиска седловой точки первого порядка фиксировалась. Последнее находили используя геометрию состояний, находящихся до и после ПС на координате реакции. В найденных таким образом точках проводили расчет частот нормальных колебаний, и, с помощью программы MOLTRAN, энтальпию, энтропию ( $S_{298}^0$ ,  $H_{298}^0$ ). Все последующие данные, если это не оговорено, получены в базе 6-31+G\*\*.

Константа скорости растет с деформацией экспоненциально, такая зависимость вообще характерна для реакций с напряжением, независимо от порядка и механизма. Отношение скоростей реакции через ПС1 и ПС2 для этилена составляет примерно 100:1, для 1-хлорэтилена – примерно 1:2, поэтому в последнем случае можно в принципе наблюдать продукты ПС2.

## АДСОРБЦИЯ КИСЛОРОДА НА ЗОЛОТЕ В РАСТВОРЕ ПОВЕРХНОСТНО НЕАКТИВНОГО ЭЛЕКТРОЛИТА

\*<sup>1</sup>*Манжос Р.А.*, <sup>1</sup>*Кривенко А.Г.*, <sup>2</sup>*Сафонов В.А.*,  
<sup>2</sup>*Чоба М.А.*

<sup>1</sup>*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*, <sup>2</sup>*МГУ им. М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия*

\**rmanzhos@icp.ac.ru*

Электроды из золота находят широкое применение в электрохимических исследованиях. Принято считать, что область идеальной поляризуемости Au находится в интервале  $-1.0 - 0.5$  В (н.к.э.). Однако, эти данные были получены с использованием потенциодинамических методов и могут отличаться от результатов измерений «по точкам»<sup>1</sup>.

В настоящей работе с помощью метода импедансометрии было изучено поведение обновляемого механическим срезом золотого электрода в растворе поверхностно неактивного электролита (NaF). Показано, что интервал потенциалов  $-1.0 - 0$  В является областью истинной идеальной поляризуемости. При потенциалах, положительнее 0 В, емкость Au-электрода уменьшается со временем контакта обновленной поверхности с раствором. Этот эффект связан с протеканием медленного домонослойного окисления поверхности металла.

Использование метода лазерного температурного скачка потенциала (ТС) в применении к изучению адсорбции кислорода на Au позволило получить важную информацию об изменении заряда электрода в зависимости от времени контакта неокисленной поверхности металла с раствором. Для восстановления окисленной поверхности Au-электрод выдерживали при  $-0.8$  В в течение 5 мин. Затем задавали необходимое значение потенциала  $E$  и проводили измерение ТС. Оказалось, что при  $E < 0$  В, кинетика изменения потенциала ( $\Delta E, t$ ), вызванного нагревом металла лазерным импульсом, не меняется со временем выдержки электрода, происходит лишь незначительное изменение величины  $\Delta E$ . Другая картина наблюдается при  $E > 0$  В. Так, в начальный момент времени после переключения потенциала с  $-0.8$  В величина  $\Delta E$  принимает положительное значение, через  $\sim 5$  мин происходит смена знака и дальнейшее увеличение абсолютного значения  $\Delta E$ . Наблюдаемые особенности свидетельствуют о перезарядке поверхности Au, вызванной адсорбцией кислорода, которая происходит с частичным переносом заряда.

# ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ПРИ ТВЕРДОФАЗНОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ СОЛЕЙ УРАНИЛА С ДИФТОРИДОМ КСЕНОНА

<sup>1</sup> *Мухамадиева С.Р.*, <sup>2</sup> *Итуллина А.Н.*, \*<sup>2</sup> *Масягутова Г.А.*

<sup>1</sup> *БГПУ им. М.Акмуллы, Уфа, Россия*, <sup>2</sup> *ИОХ УНЦ РАН, Уфа, Россия*

\**masgul@anrb.ru*

Существенным обстоятельством, которое дает возможность наблюдать хемилюминесценцию (ХЛ) при твердофазном окислении солей урана (IV) соединениями ксенона, является значительный рост выхода флюоресценции ионов уранила при переходе к твердым солям. Ранее сообщалось о яркой ХЛ при взаимодействии некоторых солей урана(IV) с дифторидом ксенона [1]. В данной работе обнаружена яркая, видимая невооруженным глазом ХЛ при взаимодействии некоторых комплексов уранила с дифторидом ксенона в твердой фазе. Интересной особенностью реакции является неожиданно высокая яркость свечения (выше, чем при окислении солей урана(IV)), несмотря на то что, уранил-ион в ходе реакции не меняет степени окисления (VI).

По спектрам ХЛ определен эмиттер свечения - возбужденный ион уранила. Изучена зависимость кинетики ХЛ при взаимодействии солей уранила с дифторидом ксенона от координационного окружения эмиттера свечения, от соотношения количеств реагентов. Выявлено, что яркость и продолжительность испускания ХЛ увеличиваются при уменьшении количества введенного дифторида ксенона. При этом наибольшая интенсивность ХЛ достигается при гидрофосфатном координационном окружении.

Проведены фотофизические исследования, свидетельствующие об изменении координационной сферы уранила в ходе взаимодействия с дифторидом ксенона. Поскольку уран в исходной соли находится в высшей степени окисления -(VI)-, то предполагается, что первично возбужденная частица образуется в реакции дифторида ксенона с координированной (кристаллизационной) водой с последующей передачей энергии возбуждения на уранил - ион.

## Литература

- [1] Masyagutova G., Mamykin A., Tananaev I., Kazakov V., Myasoedov F. // Mend. Comm. 2001. V. 21. P. 7.

## ПРИЭЛЕКТРОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ПОДВОДНОМ РАЗРЯДЕ ТИПА ТОРЦЕВОГО

*\*Силкин С.В., Хлюстова А.В., Максимов А.И.*

*ИХР РАН, Иваново, Россия*

*\*SSV-bunker@rambler.ru*

Электрические разряды, совмещенные с раствором электролита так, что зажигание происходит внутри жидкой фазы, называют подводными разрядами. Данный тип разрядов характеризуется возможностью получения активных частиц в растворе электролита, что позволяет проводить специфические реакции в жидкой фазе [1]. Однако, несмотря на развитие прикладных аспектов в этой области [2], остается много теоретических вопросов, интересных с точки зрения фундаментальной науки. В данной работе изучаются процессы, происходящие вблизи электродов при зажигании подводного разряда типа торцевого.

В наших экспериментах, мы наблюдали распыление графитового электрода диаметром 5 мм опущенного в раствор сульфата натрия с концентрациями 0,001 М при напряжении от 3000 В до 8000 В постоянного тока. Скорость распыления рассчитывалась по кинетическим кривым для различных значений эдс в диапазоне 3-8 кВ. При зажигании торцевого разряда на переменном токе в том же электролите с той же концентрацией в диапазоне эдс 3-8кВ наблюдалось лишь незначительное распыление. После обработки раствора торцевым разрядом, зажженным на постоянном токе, наблюдалось закономерное изменение рН в сторону его уменьшения. В случае зажигания торцевого разряда на переменном токе рН раствора наоборот увеличивался. В раствор электролита добавляли гексацианоферрат калия (III) в количестве 0,001 моль/л, который служил индикатором ионов Fe(II). Мы установили, что при горении разряда на постоянном токе происходит разрушение внутренней координационной сферы гексацианоферрата калия (III). Данное явление не наблюдалось при зажигании разряда на переменном токе. Мы связываем данные наблюдения с различными процессами, происходящими при зажигании торцевого разряда на постоянном или переменном токе.

### Литература

- [1] Titova Y. V., Stokozenko V. G., Maximov A.I. // IEEE Transactions on plasma science. 2010. V. 0093-3813. P. 1.
- [2] Стройкова И. К., Максимов А. И. // Электронная обработка материалов. 2002. №6 С. 43.

**ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА  
ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ И ВЗРЫВА.  
СОСТОЯНИЕ ВЕЩЕСТВА В  
ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ**

## ПРИРОДА ВЗРЫВНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ АЗИДОВ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ

*\* Ананьева М.В., Кригер В.Г., Каленский А.В.,  
Гришаева Е.А., Боровикова А.П.  
КемГУ, Кемерово, Россия  
\*kriger@kemsu.ru*

Азиды тяжелых металлов (АТМ) являются уникальным энергетическим материалом, так как в зависимости от условий инициирования проявляют черты как цепной, так и теплового механизмов взрыва. Целью работы является создание кинетической модели инициирования цепно-тепловой реакции быстрого разложения АТМ.

В основу модели кинетической модели инициирования реакции была положена собственно-дефектная модель цепной реакции [1], дополненная стадиями роста металла [1]. Модель учитывает два механизма положительной обратной связи: генерацию электронных возбуждений и собственных дефектов решетки в результате дезактивации возбужденных молекул азота (разветвление цепи), образовавшихся при разложении анионной подрешетки, и изменение констант скоростей элементарных стадий с ростом температуры. Учитывается механизм отрицательной обратной связи, заключающийся в том, что образующиеся и растущие при разложении малоатомные кластеры серебра играют роль центров рекомбинации электрон-дырочных пар - ингибиторов цепной реакции.

В рамках модели показано, что в условиях стационарного нагрева развитие реакции сопровождается одновременным ростом температуры и концентрации ингибитора и происходит при относительно небольшом отклонении концентраций промежуточных продуктов от квазиравновесных значений, поэтому взрыв в таких условиях можно назвать преимущественно тепловым.

При инициировании импульсным излучением реакция развивается преимущественно по цепному механизму. На величине пороговой плотности энергии инициирования взрывного разложения разогрев образца практически не сказывается.

### Литература

- [1] Кригер В.Г., Каленский А.В., Вельк В.В., Колпаков О.Л. // ЖНиПФ. – 2000. – Т. 45. – № 4. – С. 7 – 13.
- [2] Кригер В.Г., Каленский А.В., Вельк В.В. // Известия Вузов. Физика 2000. – Т. 43. № 11. С. 118 – 123.



# ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ФИЛЬТРАЦИОННОМ ГОРЕНИИ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ШЛАМОВ, СОДЕРЖАЩИХ ЖЕЛЕЗО И ЦИНК

*\* Берестов А.С., Гудкова И.Ю.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*enzo.msu@gmail.com*

Была поставлена задача выделения цинка из металлургического шлама с массовой долей цинка около 12%. Подобного рода шламов в России накоплено огромное количество, вопрос об их переработке или утилизации стоит очень остро, поскольку они не могут быть переработаны традиционными способами. Такие шламы могут быть возвращены в производство только в том случае, если содержание цинка в них будет повышено как минимум до 15%.

Поскольку летучесть свободного цинка при повышенных температурах несравненно выше, чем летучесть железа, решено было использовать режим фильтрационного горения (ФГ) для того, чтобы цинк, удаляющийся из горячей зоны ФГ, конденсировался в холодной части продвигающейся шихты, еще не подверженной процессу горения, тем самым это должно привести к обогащению цинком хвостовой части шихты, которую можно потом вернуть в производство.

В рамках работы были выполнены термодинамические расчёты возможного состава продуктов как в окислительной, так и в восстановительной зонах реактора. Расчёты выполнялись в программе моделирования фазового и химического равновесия «Тетга». По расчётным данным максимальный эффект будет достигаться при создании в реакторе горячей восстановительной зоны (инверсная волна), где будет преобладать металлический цинк. Железо, при этом остаётся в конденсированной фазе и не влияет на итог эксперимента. Были проведены две серии экспериментов по сжиганию шихты, содержащей шлам: варьировалась доля горючего (угля) и варьировалась скорость потока окислителя (воздуха). Сжигание проводили в модельном кварцевом реакторе. Шихта, загружаемая в реактор, состояла из гранулированного активированного угля и гранул шихты размером 2,5-3,5 мм, изготовленных методом прессования. Продукты реакции анализировались химическим и рентгенофазовым анализом, методом энергодисперсионной рентген-флуоресцентной спектроскопии.

Результаты анализа показали, что в процессе фильтрационного горения цинк выделяется из реакционной смеси и обогащает хвостовую, еще не прореагировавшую часть шихты, до содержания в ней 15% Zn, что позволяет перерабатывать концентрат традиционными методами.

# НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЕ ПРЕВРАЩЕНИЕ БАЛЛАСТИРОВАННОГО ЦИКЛОТРИМЕТИЛЕНТРИНИТРАМИНА (RDX) В ТАБЛЕТИРОВАННОМ ВИДЕ

*\*Бодрова А.В., Алешин В.В., Михайлов Ю.М.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*bodrova\_87@mail.ru*

Низкотемпературное беспламенное горение энергетических материалов в балластированных полимерных системах характеризуется отсутствием пламени, относительно низкими температурами во фронте горения (280-550)С и скоростью его распространения (0,05-1,0) мм/с. В этом режиме распространение процесса происходит в виде отдельных очагов, хаотично передвигающихся по исходной смеси. Для изучения влияния масштабных эффектов на хаотичное перемещение очагов процесс низкотемпературного горения балластированных энергетических материалов может быть организован в массе отдельных гранул или таблеток.

Целью настоящей работы являлось изучение возможности организации процесса низкотемпературного беспламенного горения таблетированных смесей RDX с оксидом цинка и канифолью.

Разработана экспериментальная методика изготовления опытных образцов в таблетированном виде. Установлено, что существует узкий интервал величин давления прессования, при котором изготавливаемые таблетки обладают наибольшей прочностью. Для улучшения прессуемости образцов и снижения пылеобразования исходной смеси при прессовании предложено модифицировать ее добавкой малого количества парафина.

Разработана и освоена экспериментальная методика проведения испытаний полученных образцов в лабораторном реакторе сжигания. Показано, что процесс низкотемпературного беспламенного горения RDX может устойчиво протекать в таблетированных смесях. Однако, при малом содержании RDX в исходной смеси отдельные области таблетированной массы могут остаться не прогоревшими.

В результате исследования низкотемпературного превращения балластированного RDX установлено, что горение как отдельных таблеток, так и всей таблетированной смеси происходит за счёт пространственного распространения очагов горения по эстафетному механизму.

# ЗАВИСИМОСТЬ ДЛИТЕЛЬНОСТИ ИНДУКЦИОННОГО ПЕРИОДА ВЗРЫВА АЗИДА СЕРЕБРА ОТ НАЧАЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ ОБРАЗЦА

*Гришаева Е.А., Кригер В.Г., Каленский А.В.,*

*\*Звеков А.А., Ананьева М.В.*

*КемГУ, Кемерово, Россия*

*\*kriger@kemsu.ru*

Расчет в рамках различных моделей зависимости индукционного периода взрыва от условий инициирования и сравнение с экспериментом часто позволяет определить модель и механизм взрыва. Цели работы: Рассчитать в рамках модели цепно-теплого взрыва азидо серебра [1] кинетические зависимости реагентов и температуры при инициировании взрыва нагревом; Получить зависимость длительности индукционного периода взрыва от начальной температуры образца.

В качестве начальных условий принимались равновесные концентрации электронов и дырок, и собственных дефектов при температуре 300 К. Начальные концентрации промежуточных и конечных продуктов реакции устанавливались равными нулю. Разогрев образца считался мгновенным, температура “стенки” в слагаемом ньютоновского теплоотвода задавалась равной начальной температуре образца.

В случае перехода от квазистационарного разложения к режиму взрыва кинетические зависимости реагентов и температуры приобретают S-образный вид. Рассчитаны критические значения температуры, при которых реакция переходит в самоускоряющийся режим. Начальный участок медленного изменения концентраций реагентов и температуры отождествлялся с индукционным периодом. В результате получена зависимость индукционного периода от начальной температуры образца. Она свидетельствует об уменьшении длительности индукционного периода при росте температуры. При построении зависимости в аррениусовских координатах ( $\ln \tau - T^{-1}$ ), на ней выделяется два линейных участка. Эффективная энергия активации на низкотемпературном участке составляет 1.17 эВ. При дальнейшем увеличении температуры зависимость ( $\ln \tau - T^{-1}$ ) спрямляется с энергией активации 0.2 эВ. Показано, что эффективные энергии активации не зависят от коэффициента теплоотдачи.

## Литература

- [1] Кригер В.Г., Каленский А.В., Звеков А.А., Гришаева Е.А // Известия ВУЗов. Физика. – 2011. Т. 54. № 1/3. – С. 24 – 31.

# ПОИСК ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ МЕЖДУ ЭЛЕМЕНТНЫМ СОСТАВОМ ТВЕРДОГО РАКЕТНОГО ТОПЛИВА, ЕГО ТЕПЛОСОДЕРЖАНИЕМ, ВЕЛИЧИНОЙ УДЕЛЬНОГО ИМПУЛЬСА И ТЕМПЕРАТУРОЙ ГОРЕНИЯ

*\*Дорофеевко Е.М., Лемперт Д.Б.  
ИПХФ РАН, Черногоровка, Россия  
\*emdor@icp.ac.ru*

Для решения ряда практических задач, связанных с созданием твердых ракетных топлив (СТРТ), необходимо ограничение температуры в камере сгорания ( $T_c$ ). Как правило, при изменении композиции СТРТ снижение  $T_c$  сопровождается падением величины удельного импульса ( $I_{sp}$ ). Повышение теплосодержания ( $\Delta H_f^o$ ) исходной композиции однозначно повышает как  $I_{sp}$ , так и  $T_c$ , поэтому при решении поставленной задачи — создание композиций с относительно высоким  $I_{sp}$  при относительно низкой  $T_c$  — придется искать компромисс. Поэтому, чтобы найти пути снижения  $T_c$  с минимальной потерей в  $I_{sp}$  следует найти общие закономерности между элементным составом СТРТ, его теплосодержанием, величинами  $I_{sp}$  и  $T_c$ .

Рассчитаны величины  $I_{sp}$  и  $T_c$  набора композиций на базе C, H, N, O соединений с варьированием теплосодержания ( $\Delta H_f^o$ ) от 0 до 4400 кДж/кг и элементного состава  $N_xH_1C_yO_y$  с варьированием величин  $x$  и  $y$ . Решено удерживать атомное соотношение C/O = 1, так как при C/O > 1 углерод не догорает, что снижает  $I_{sp}$ , а при C/O < 1 начинается окисление до CO<sub>2</sub>, что существенно повышает  $T_c$ .

Построены зависимости  $I_{sp}$  и  $T_c$  от величин  $x$ ,  $y$  и  $\Delta H_f^o$ , найдены формы кривых, соответствующих постоянному  $I_{sp}$  или  $T_c$ , как функции  $x$ ,  $y$  и  $\Delta H_f^o$ , найдены области существования составов, удовлетворяющих условию  $I_{sp} > A$  и  $T_c < B$ , где  $A$  — требуемая величина  $I_{sp}$  от 180 до 240 с, а  $B$  — заданная предельная величина  $T_c$  от 1500 до 2400 К с шагом 300 К. Например, показано, что реально невозможно получить значение  $T_c < 1500$  К при  $I_{sp} > 222$  с. Показано, что рост доли углерода снижает и допустимую величину  $\Delta H_f^o$ , при которой существует решение. Повышение N/H при равных величинах  $\Delta H_f^o$  повышает  $I_{sp}$  и снижает  $T_c$ , но возможности повышения доли водорода в твердой композиции ограничены природой.

Полученные количественные зависимости между элементным составом композиции, ее теплосодержанием, величинами  $I_{sp}$  и  $T_c$  должны стать базой для дальнейшего конструирования составов СТРТ с максимально высокой величиной  $I_{sp}$  при условии, что  $T_c$  не превысит величину, допустимую для данного типа ракетного двигателя.

# ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ВАЛЕНТНОГО СОСТОЯНИЯ ЖЕЛЕЗА В ИМПАКТНЫХ ПРОЦЕССАХ

*Егоров Е.С.*

*МФТИ, Долгопрудный, Россия*

*geniaegorov@mail.ru*

В работе исследовалось изменение валентного состояния железа, при воздействии на вкрапления оливина  $(Mg, Fe)_2[SiO_4]$  наносекундным лазерным импульсом. Параметры лазерного воздействия моделировали сверхскоростные метеоритные удары, которые приводят к интенсивному нагреву вещества в зоне раздела и образованию высокотемпературной плазменной среды. Температура плазмы в этой области может достигать  $10^5 - 10^6$  К при давлении в  $10^6$  атмосфер. Из-за значительной степени диссоциации больших молекул на ранней стадии разлета плазменного факела в области рекомбинации можно ожидать химических преобразований и синтеза новых молекул, а при достаточно больших интенсивностях излучения (что соответствует более быстрому удару метеорита о поверхность планеты) можно ожидать восстановления железа и других элементов.

Эксперименты проводились в ИКИ РАН на лазерной установке "Сатурн" на фосфатном неодимовом стекле. Установка представляет собой многокаскадную систему усиления импульса от задающего генератора с длиной волны  $\lambda = 1054$  нм. Исходные образцы представляли собой спилы силикатных пород, включающие в себя андезит, оливин и плагиоклаз. Выброс вещества конденсировался на никелевой фольге.

В результате эксперимента получили металлическое железо  $Fe^0$ , которого не было в исходном образце. При этом концентрация  $Fe^0$  увеличивается в направлении вглубь травления. Это можно объяснить следующим образом:  $FeO$  разлагается по схеме  $FeO \rightarrow Fe^0 + O$  с выделением свободного кислорода в газовую фазу. В результате рекомбинационных процессов свободный кислород может взаимодействовать с  $FeO$  по схеме  $2FeO + O \rightarrow Fe_2O_3$ . Такая упрощенная схема обеспечивает диспропорционирование  $FeO$  на нуль и трехвалентное железо.

Полученные результаты подтверждают возможность протекания окислительно-восстановительных реакций с изменением валентного состояния железа и других элементов в импактных процессах.

Подробный анализ этих явлений в лабораторных условиях позволит в дальнейшем ответить на вопрос, на сколько сильно влияют метеоритные ударные процессы на геологию планет, особенно на ранних стадиях их формирования при интенсивном метеоритном потоке, и когда эти процессы перестают играть значительную роль в завершении формирования геологии.

# ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НОВОГО ЭНЕРГОЕМКОГО ПЛАСТИФИКАТОРА НИТРОТРИАЗОЛОВОГО РЯДА НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ АЗОЛОВОГО СВЯЗУЮЩЕГО

<sup>\*2</sup>Зяблицкий С.А., <sup>2</sup>Певченко Б.В., <sup>1</sup>Суханов Г.Т.,

<sup>1</sup>Панченко Н.Ф., <sup>1</sup>Алексеева Н.А.

<sup>1</sup>ИПХЭТ СО РАН, Бийск, Россия, <sup>2</sup>ОАО ФНПЦ Алтай, Бийск,  
Россия

\*post@frpc.secna.ru

В настоящее время требуются все более энергоемкие системы с высоким уровнем характеристик, которые можно получить только с помощью новых энергоемких компонентов. Одно из направлений – использование новых активных пластификаторов. Основным требованием к новым компонентам является термодинамическая совместимость с компонентами смесевых систем и безопасность в обращении. Высокоэнергетические соединения 1,2,4-триазола в последнее время уделяется особое внимание, т.к. они обладают высокими энергетическими характеристиками, малой чувствительностью, высокой термостойкостью и широким температурным диапазоном эксплуатации.

Целью данной работы является исследование термической стойкости нового нитротриазолового пластификатора (ННТ) и возможность использование его в составе активного горюче-связующего вещества (ГСВ).

Проведенный анализ термической стойкости индивидуального пластификатора показал высокий уровень газообразования имеющий каталитический вид. Для снижения объема газовыделения рассмотрены стандартные стабилизаторы: дефиниламин и резорцин. Исследование показало, что резорцин не привел к существенному снижению уровня газовыделения, при этом использование дефиниламина позволило снизить газовыделение до уровня  $0.001 \text{ см}^3/\text{г}$  за 72 часа при температуре 353К. На его основе изготовлен смесевой пластификатор, имеющий высокую термическую стойкость для использования в ГСВ.

В качестве ГСВ использован полимер тетразольного типа, пластифицированный смесевым нитроэфир-нитротриазольным пластификатором, имеющий низкую температуру стеклования, позволяющий использовать его в широком диапазоне температур. Термическая стойкость связующего находится на одном уровне со штатными ЭКС, что позволяет использовать его в качестве ГСВ в ЭКС.

## КИНЕТИКА ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ GaAs С HCl И СМЕСЯМИ HCl / Ar

*\*Капинос С.П., Шафеев Р.В., Дунаев А.В.,  
Пивоваренок С.А.*

*ИГХТУ, Иваново, Россия*

*\*d-tritus04@mail.ru*

Для исследования взаимодействия арсенида с плазмой HCl и его смесями с Ar в условиях тлеющего разряда постоянного тока использовался проточный стеклянный плазмохимический реактор цилиндрической формы. Внешними параметрами разряда выступали ток разряда ( $i = 10 - 60$  мА) и давление ( $p = 20 - 100$  Па) плазмообразующего газа. Фрагменты полированных пластин GaAs площадью  $1 \text{ см}^2$  травили в области положительного столба разряда. Скорость травления определялась по изменению массы образца до и после обработки на весах с точностью 50 мкг.

На кинетических кривых травления в HCl на указанном диапазоне условий в начале процесса проявляется длительный нестационарный по скорости участок, связанный с медленным взаимодействием хлора со слоем естественного окисла. Его продолжительность увеличивается с ростом тока разряда и давления газа, что косвенно указывает на лимитирование скорости взаимодействия адсорбционно-десорбционными процессами.

В стационарном режиме при постоянном  $i$  возрастание  $p$  газа линейно увеличивает скорость взаимодействия. Это свидетельствует о кинетическом режиме протекания процесса и первом кинетическом порядке к концентрации активных частиц в газовой фазе. Подобная зависимость от  $i$  при постоянном  $p$  предположительно искажается из-за существенного увеличения температуры, и как следствие роста вероятности взаимодействия по закону Аррениуса.

Разбавление HCl аргоном не изменило характер кинетических кривых. Добавка инертного газа заметно уменьшает концентрацию атомарного хлора в плазме, но существенного падения скорости (до 40 % доли Ar) не наблюдается. Поэтому при идентичных временах обработки могут достигаться лучшая анизотропия и равномерность травления структур. Кроме вышеуказанных технологических эффектов, разбавление увеличивает время работы откачных средств и повышает экологичность производства, снижая содержание токсичных компонентов в отходящих газах.

# ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛН В ЭМУЛЬСИОННЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВАХ МЕТОДОМ ПРОТОННОЙ РАДИОГРАФИИ

<sup>1</sup>*Колесников С.А.*, <sup>\*3</sup>*Бабочкин К.А.*, <sup>2</sup>*Голубев А.А.*,  
<sup>1</sup>*Дудин С.В.*, <sup>2</sup>*Канцирев А.В.*, <sup>1</sup>*Лавров В.В.*, <sup>1</sup>*Минцев В.Б.*,  
<sup>1</sup>*Савченко А.В.*, <sup>2</sup>*Смирнов Г.Н.*, <sup>2</sup>*Шестов Л.М.*,  
<sup>2</sup>*Туртиков В.И.*, <sup>1</sup>*Уткин А.В.*

<sup>1</sup>*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*, <sup>2</sup>*ИТЭФ, Москва, Россия*,

<sup>3</sup>*МФТИ, Москва, Россия*

*\*bball@inbox.ru*

Эмульсионные взрывчатые вещества (ЭВВ) широко используются на практике, но процесс детонации ЭВВ изучен недостаточно. Поэтому были проведены исследования структуры детонационных волн в зарядах ЭВВ на протонно-радиографической установке, созданной на базе ускорителя ТВН-ИТЭФ [1] и с помощью лазерного интерферометра VISAR.

Исследования проводились для зарядов ЭВВ плотностью 1,07 г/3 в полиэтиленовых оболочках с внутренними диаметрами 15 мм и 20 мм. Длина заряда составляла 75-80 мм. Для этих зарядов была определена пространственная структура регистрируемых детонационных волн и измерена кривизна их фронта. Также была измерена скорость фронта волны. Для зарядов диаметром 20 мм она составила  $4.6 \pm 0,6$  км/с, диаметром 15 мм – в разных опытах от 4.0 до 4.4 км/с.

Сравнительный анализ профилей плотности, полученных с помощью протонно-радиографической установки, с профилями массовой скорости, полученными с помощью VISARa, показал, что в зарядах диаметром 20 мм наблюдалась стационарная самоподдерживающаяся детонация, а в зарядах ЭВВ той же плотности, но диаметром 15 мм в различных экспериментах были обнаружены: стационарная детонация, затухающий ударно-волновой процесс и промежуточный вариант быстро распространяющегося детонационно-подобного процесса с неидеальным фронтом. То есть, в зарядах ЭВВ возможно протекание нестационарных взрывных процессов, распространяющихся со сверхзвуковой скоростью, при диаметре заряда меньше критического диаметра детонации для ЭВВ данной плотности.

## Литература

[1] Golubev A.A. *et al.* // Tech. Phys. Lett. 2010. V. 36. I.2. P. 177-180.



# ВЛИЯНИЕ ТЕПЛОПOTЕРЬ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ФИЛЬТРАЦИОННОГО ГОРЕНИЯ УГЛЕРОДА<sup>1</sup>

*\* Колесникова Ю.Ю., Кислов В.М., Салганский Е.А.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*colesnikowa.iulya@yandex.ru*

Теплопотери являются важным фактором, влияющим на параметры фильтрационного горения (ФГ). Из-за сложности описания ФГ теплопотерями часто пренебрегают, однако на практике они есть всегда и могут существенно влиять на характеристики процесса. Целью данной работы являлось определение влияния теплопотерь на характеристики ФГ системы углерод-инерт.

Численные расчеты проводили с помощью одномерной однотемпературной модели стационарного ФГ твердого топлива, учитывающей боковые потери тепла. Результаты расчета проверяли экспериментально на лабораторном реакторе при различном уровне теплоизоляции боковой стенки. Уровень теплопотерь реактора определяли из теплового баланса.

Расчеты проводили для составов с 5 и 7% углерода («нормальная» волна), а также 50 и 80% («инверсная» волна). Коэффициент теплоотдачи варьировали от 1 до 50 Вт/м<sup>2</sup>\*К. Эксперименты проводили для составов с содержанием углерода 10% («нормальная») и 80% («инверсная» волна). В ходе исследований было установлено, что:

1. В экспериментах увеличение коэффициента теплоотдачи в два раза в случае «нормальной» волны приводит к уменьшению ширины тепловой волны в 2-2.5 раза. При этом, благодаря изменению стехиометрии окисления углерода в сторону увеличения доли СО<sub>2</sub>, температура и КПД процесса меняются слабо. В случае «инверсных» волн аналогичное увеличение коэффициента теплоотдачи приводит к уменьшению ширины тепловой волны в 1.5 раза, снижению температуры на 150<sup>0</sup>С и КПД на 25%.

2. Несмотря на ряд грубых упрощений, результаты расчетов по модели качественно согласуются с экспериментальными данными. Полученные результаты могут быть полезны при масштабном переходе от лабораторных к промышленным установкам и при выборе необходимой теплоизоляции стенок реактора.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при частичной поддержке гранта Президента РФ (МК-3125.2011.3) и программы № 3 Президиума РАН «Химические аспекты энергетики».

# ПОЛУЧЕНИЕ ФАЗЫ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ НИТРИДА КРЕМНИЯ МЕТОДОМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО УДАРНОГО СЖАТИЯ

*\*<sup>2</sup>Кудакина В.А., <sup>1</sup>Якушев В.В., <sup>1</sup>Жуков А.Н.,  
<sup>1</sup>Рогачёва А.И.*

*<sup>1</sup>ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия, <sup>2</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия*

*\*vera257@list.ru*

Повышенный интерес к нитриду кремния в последнее время связан с открытием его шпинельной модификации  $\gamma$  -  $\text{Si}_3\text{N}_4$  [1]. Однако главным препятствием к более детальному изучению свойств  $\gamma$  -  $\text{Si}_3\text{N}_4$  являются технические трудности его получения. Поэтому подбор оптимальных условий синтеза по давлению и температуре с достаточным выходом новой фазы является актуальной задачей.

Одним из перспективных методов получения фаз высокого давления является ударно-волновой метод. Известно, что рост температуры при ударном сжатии способствует как образованию  $\gamma$  -  $\text{Si}_3\text{N}_4$  в фазе сжатия, так и его обратному переходу в волне разгрузки из-за остаточных температур [2]. В связи с этим интерес представляет использование метода высокотемпературного ударного сжатия (ВТУС) [3], который позволяет сообщить образцу дополнительный нагрев при сжатии и обеспечить резкую закалку образовавшейся фазы при разгрузке за счёт добавления в состав образца щёлочно-галлоидных солей.

Ударно-волновое нагружение образцов, заключённых в медные ампулы сохранения, осуществлялось ударом алюминиевой пластины, разогнанной продуктами взрыва до скорости 2.5 км/с. Фазовый состав и структурные характеристики нитрида кремния до и после ударного воздействия определялись рентгенографическим методом Ритвелда.

В работе показана возможность получения  $\gamma$  -  $\text{Si}_3\text{N}_4$  методом ВТУС. Проведено сравнение полученных результатов с данными по ударному сжатию нитрида кремния с медным порошком и другими добавками.

## Литература

- [1] Zerr A. et al. // Nature. 1999. V. 400. P. 340-342.
- [2] Юношев А.С. // ФГВ. 2004. Т.40. №3. С. 132-135.
- [3] Курдюмов А.В. и др. Мартенситные и диффузионные превращения в углероде и нитриде бора при ударном сжатии. Киев. 2005. 192 с.

# ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОСНОВНЫХ ОТЛИЧИЙ РАКЕТНЫХ ТОПЛИВ С АЛЮМИНИЕМ ИЛИ ЦИРКОНИЕМ И ОРГАНИЧЕСКИМ ОКИСЛИТЕЛЕМ, СОДЕРЖАЩИМ КИСЛОРОД И ФТОР

*\*<sup>2</sup>Михайлова З.А., <sup>1</sup>Лемперт Д.Б.*

*<sup>1</sup>ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия, <sup>2</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия*

*\*zoaya-mikhailova@mail.ru*

Ранее при изучении энергетических характеристик твердых ракетных топлив, содержащих помимо С, Н, N, О дополнительно Al и F, было обнаружено, что при введении Al вначале величина удельного импульса (Isp) немного падает, а потом повышается. В этом наблюдалась определенная аномалия, наблюдаемая только при очень низких содержаниях Al (до 2 масс.%).

В настоящей работе рассматривается, имеет ли место такая же аномалия в случае составов с Zr. Проведены термодинамические расчеты топливных композиций модельное связующее + окислитель + Al или Zr при варьировании как содержания Al и Zr, так и величины суммарной энтальпии образования, соотношения O:F в композиции. Показано, что в составах, содержащих Zr вместо Al, тоже наблюдается определенная аномалия, хотя несколько видоизмененная, т.е. если в случае составов с Al на кривой зависимости Isp от доли Al наблюдается минимум при определенном содержании Al, то в случае Zr величина Isp при росте доли Zr практически всегда падает, но при этом кривая зависимости Isp от Zr имеет точку перегиба, т.е. так же, как и в составах с Al, наблюдается точка по содержанию металла, когда вторая производная Isp от содержания металла равна нулю. Показано, что в составах с Zr рост энтальпии образования ведет к увеличению критического содержания Zr, когда вторая производная равна нулю. Однако, в составах, содержащих Zr, эта аномалия проявляется количественно существенно менее выражено, чем в составах с Al. С помощью программы расчета химических равновесий Терра проведено исследование состава металлсодержащих продуктов сгорания ракетных топлив (это конденсированные оксиды, большой набор газообразных фторидов и оксифторидов). Показано, что причиной менее выраженной аномалии в случае Zr является то, что Zr, в отличие от Al, имеет большее сродство к кислороду, нежели к фтору, т.е. при равных температурах доля газообразных Zr-содержащих продуктов в суммарном количестве Zr-содержащих продуктов сгорания существенно ниже, чем аналогичная величина в Al-содержащих.

## РАЗОГРЕВ ВКЛЮЧЕНИЙ В ИНЕРТНОЙ СРЕДЕ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ

*Никитин А.П., Кригер В.Г., Каленский А.В.,*

*\*Звекон А.А., Зыков И.Ю.*

*КемГУ, Кемерово, Россия*

*\*kriger@kemsu.ru*

Микроочаговая модель инициирования взрывного разложения энергетических материалов лазерным излучением основывается на предположении, что в объеме вещества находятся включения, сильно поглощающие лазерное излучение. Предполагается, что вблизи включения во время действия импульса происходит значительное повышение температуры и образования очага реакции. Наименее обоснованными постулатами микроочаговой модели являются:

1. эффективность поглощения излучения равна единице;
2. постоянство теплоемкости энергетического материала и материала включения в интервале температур от 300 до 4000 К;
3. отсутствие фазовых переходов при нагревании до температур выше 1000 К.

Цели работы: Оценить максимальные температуры разогрева включений с учетом рассчитанных в рамках теории Ми коэффициентов эффективности поглощения лазерного излучения и фазовых переходов в энергетическом материале и материале включения в изобарном приближении на примере разогрева включения алюминия в матрице тетранитрата пентаэритрита (ТЭНа).

Рассчитаны зависимости коэффициента эффективности поглощения излучения с длиной волны 1064 нм от радиуса включения алюминия в матрице ТЭНа (комплексные показатели преломления  $n_i = 0.92 - 8.2i$  и  $n = 1.55$  соответственно). Максимальная эффективность поглощения 0.255 соответствует радиусу включений алюминия 100 нм.

Проведены расчеты максимальной температуры разогрева включений с учетом коэффициентов эффективности поглощения лазерного излучения и фазовых переходов в энергетическом материале и материале включения в изобарном приближении на примере разогрева включения алюминия в матрице ТЭНа. При расчетах использовалось приближение однородного прогрева включения. Учитывались процессы кондуктивного теплоотвода, плавления и испарения энергетического материала и материала включения в изобарном приближении.

## КИНЕТИЧЕСКИЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРОЦЕССОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРОННОГО УДАРА В ПЛАЗМЕ $\text{CH}_4$

*\* Семенова О.А., Ефремов А.М., Светцов В.И.*

*ИГХТУ, Иваново, Россия*

*\*oa-semenova@mail.ru*

Неравновесная низкотемпературная газоразрядная плазма на основе  $\text{CH}_4$  находит широкое применение для получения поли- и нанокристаллических алмазоподобных пленок, а также углеродных наноструктур. Кроме этого, в плазме  $\text{CH}_4$  проводят процессы травления оксидов цинка, индия и олова, используемых в оптоэлектронных устройствах. Разработка и оптимизация плазменных технологий невозможна без понимания механизмов физико-химических процессов, формирующих стационарные параметры и состав плазмы. Одним из эффективных инструментов получения такой информации является моделирование плазмы.

Целью данной работы являлось формирование набора сечений процессов под действием электронного удара для молекулы  $\text{CH}_4$ , а также получение данных по кинетическим и транспортным характеристикам электронов.

Моделирование плазмы проводилось в однокомпонентном приближении по нейтральным невозбужденным частицам. Допустимость такого подхода ограничена диапазоном условий, обеспечивающим степени диссоциации молекул  $\text{CH}_4$  менее 20%. Алгоритм моделирования базировался на решении стационарного кинетического уравнения Больцмана без учета электрон-электронных соударений и ударов второго рода.

Сформирован набор сечений процессов под действием электронного удара для молекулы  $\text{CH}_4$ , дополненный новыми экспериментальными данными по сечениям диссоциативной ионизации и диссоциации  $\text{CH}_4$  на нейтральные фрагменты. Показано, что сформированный набор сечений обеспечивает удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных литературных данных по скорости дрейфа электронов, их характеристической энергии и таунсендовскому коэффициенту ионизации. Проведены расчеты ФРЭЭ, интегральных характеристик электронного газа и констант скоростей процессов при электронном ударе. Определены пути диссипации энергии, вкладываемой в плазму, в упругих и неупругих столкновениях электронов с молекулами  $\text{CH}_4$ . Установлены основные механизмы объемной генерации нейтральных и заряженных частиц.

# НАНЕСЕНИЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ ПОДЛОЖКУ ПОСРЕДСТВОМ ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА АТМОСФЕРНОГО ДАВЛЕНИЯ С ЭЛЕКТРОЛИТНЫМ КАТОДОМ

*\*Хорев М.С., Максимов А.И., Хлюстова А.В.*

*ИХР РАН, Иваново, Россия*

*\*khorev\_mikhail@mail.ru*

Получение тонких оксидных пленок на поверхности металлических и диэлектрических подложек было представлено в работе японских ученых [1]. Осаждение проводилось при пониженном давлении и подложка помещалась внутрь цилиндрического потенциального электрода. В данной работе представлены результаты экспериментов по получению пленок на диэлектрической (стеклянной) подложке в системе тлеющего разряда атмосферного давления с электролитным катодом.

Подложка располагалась в непосредственной близости от анода, частично попадая в зону положительного столба. В качестве рабочих электролитов использовались 0.1М растворы  $K_2Cr_2O_7$ ,  $Cr(NO_3)_3$  и  $SnCl_2$ . Выбор данных веществ обуславливался их хорошей наглядностью при нанесении. Эксперименты проводились при напряжении 1500 кВ и токе 100 мА. Время обработки составляло около 30 минут. Структура пленок исследовалась на атомно-силовом микроскопе Solver 47Pro, который позволил получить морфологический и фазовый профили.

Пленки получились довольно ровные, со средней шероховатостью около 50 нм. Также наблюдалось уменьшение толщины пленки в радиальном направлении от приэлектродной области.

Был проведен качественный анализ полученных образцов, на предмет изучения состава образовавшихся пленок.

## Литература

- [1] Suzuki T., Matsushima Y. et al. // J. Materials Science. 2002. V. 37. P. 595.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ СОСТАВА И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ВИДОВ ТОПЛИВ С УЧЕТОМ ФАЗОВЫХ И ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ<sup>1</sup>

*\* Шмельков Ю.Б., Самуйлов Е.В.*

*ОАО ЭНИН им. Г.М. Кржижановского, Москва, Россия*

*\*YurezSml@mail.ru*

Расчет состава в производился при помощи программы ТЕТРАН, разработанной в ЭНИНе им. Г.М. Кржижановского [1]. Программой ТЕТРАН предусмотрена возможность расчёта многофазных систем. Типы конденсированных фаз задаются предварительно, число их определяется правилом фаз Гиббса. Программа обеспечена базой термодинамических данных для 3000 индивидуальных веществ, образующихся в результате различных реакций.

Процессы переноса в нейтральных средах хорошо описываются кинетической теорией газов, изложенной в известной книге Гиршфельдера. Далее эта теория получила развитие в работах Мэсона и Мончика. Если среднее время между столкновениями, сопровождающимися обменом энергией между внутренними и поступательными степенями свободы молекул и среднее время между столкновениями, сопровождающимися химическими реакциями, достаточно малы, так что газ находится в состоянии локального термического равновесия, то коэффициент теплопроводности смеси многоатомных газов можно представить в виде суммы поступательной теплопроводности тяжёлых компонентов, электронной теплопроводности, реакционной теплопроводности и вклада от диффузионного переноса энергии внутренних степеней свободы. Было проведено сравнение результатов расчета с известными экспериментальными данными для чистых газов и газовых смесей. Оно показало неплохую сходимость, максимальное отклонение результатов расчета от экспериментальных данных составило 8% для вязкости и 9% для теплопроводности.

## Литература

- [1] Герасимов Г.Я., Жегульская Н.А., Рождественский И.Б. и др. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания и конверсии органических топлив // Математическое моделирование. 1998. Т. 10. № 8. С. 3-16.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке РФФИ грант № 10-08-00468.

## ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ПЛАЗМЫ ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА ПОСТОЯННОГО ТОКА В СМЕСИ HCl/H<sub>2</sub>

*\* Юдина А.В., Ефремов А.М., Светцов В.И.*

*ИГХТУ, Иваново, Россия*

*\*gvinok@yandex.ru*

Проведен модельный анализ влияния состава смеси HCl с H<sub>2</sub> на стационарные параметры плазмы (приведенная напряженность электрического поля, энергетическое распределение электронов, константы скоростей процессов под действием электронного удара) и концентрации заряженных частиц в условиях тлеющего разряда постоянного тока.

Моделирование плазмы проводилось в пятикомпонентном приближении по нейтральным невозбужденным частицам для условий цилиндрического проточного плазмохимического реактора. В диапазоне условий: давление 40–200 Па, сила тока 15–25 мА. Алгоритм моделирования базировался на решении стационарного кинетического уравнения Больцмана без учета электрон-электронных соударений и ударов второго рода. Выходными параметрами модели служили стационарные значения приведенной напряженности поля, функция распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ), интегральные характеристики электронного газа (средняя энергия, скорость дрейфа, приведенные коэффициент диффузии и подвижность).

Увеличение доли H<sub>2</sub> в смеси HCl с H<sub>2</sub> приводит к снижению приведенной напряженности поля. Это связано со снижением скорости гибели электронов в процессе диссоциативного прилипания и с ростом концентрации электронов в плазме. Характер изменения ФРЭЭ с ростом степени разбавления HCl водородом зависит от общего давления смеси и в области низких давлений не коррелирует с поведением параметра приведенной напряженности поля и сопровождается увеличением средней энергии электронов, а также констант скоростей процессов под действием электронного удара, пороговые энергии которых превышают верхнюю границу диапазона средней энергии электронов или соизмеримы с ней. В области высоких давлений разбавление HCl водородом сопровождается снижением доли быстрых электронов и средней энергии электронов.

В сочетании со снижением скорости диссоциативного прилипания из-за снижения концентрации молекул HCl в исходной смеси, это обеспечивает рост концентрации электронов в плазме, а также снижение абсолютной и относительной концентрации отрицательных ионов.



## УДАРНАЯ СЖИМАЕМОСТЬ ПОРИСТЫХ ОБРАЗЦОВ ИЗ НИТРИДА КРЕМНИЯ

*\* Якушев В.В., Уткин А.В., Жуков А.Н.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*yakushev@icp.ac.ru*

Проведены исследования ударной сжимаемости пористых образцов из гексагональной модификации нитрида кремния  $\beta$ - $\text{Si}_3\text{N}_4$  (пористость 15%) в диапазоне давлений до 55 ГПа. Построены ударная адиабата и зависимость скорости звука в образцах от давления ударно-волнового нагружения.

Высокие давления в образцах создавались ударом алюминиевой пластины-ударника, разогнанной продуктами взрыва до нескольких километров в секунду. Профили распространяющихся в образцах ударных волн регистрировались лазерным интерферометром VISAR на границе образца с водяным окном. Скорость ударной волны определялась по меткам времени.

На зарегистрированных профилях и ударной адиабате не обнаружено особенностей связанных с фазовым переходом  $\beta$ - $\text{Si}_3\text{N}_4$  в высокоплотную шпинельную модификацию  $\epsilon$ - $\text{Si}_3\text{N}_4$  [1]. Однако, сравнение полученных результатов с данными по ударной сжимаемости сплошных образцов из нитрида кремния [2] показывает, что фазовый переход имеет место, причем в пористых образцах он начинается при существенно меньшем давлении (приблизительно 23 ГПа), чем в сплошных (36 ГПа), что может быть объяснено сильным разогревом пористого материала в ударной волне, приводящим к снижению порогового давления фазового перехода [3]. Характер зависимости скорости звука в образцах от давления также подтверждает тот факт, что при ударно-волновом воздействии нитрид кремния претерпевает существенные изменения. В частности, излом при 23 ГПа связывается с началом преращения в  $\epsilon$ -фазу.

### Литература

- [1] Zerr A., Miehe G., Serghiou G. et al. // Nature. 1999. V. 400. PP. 340 - 342.
- [2] He H., Sekine T., Kobayashi T. et al. // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. PP. 11412-11417.
- [3] Sekine T., He H., Kobayashi T. et al. // Appl. Phys. Letters. 2000. V. 76. PP. 3706-3708.



**КИНЕТИКА И МЕХАНИЗМ СЛОЖНЫХ  
ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ. КАТАЛИЗ**

## ЧЕРЕДУЮЩИЕСЯ СОПОЛИМЕРЫ СО С ОЛЕФИНАМИ. СИНТЕЗ И СВОЙСТВА

*\* Алферов К.А., Чуканова О.М., Белов Г.П.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*kirill-alpherov@yandex.ru*

Синтез чередующихся сополимеров монооксида углерода (СО) с олефинами (поликетоны) представляет несомненный интерес, т. к. такие продукты обладают уникальным набором свойств [1] (способность к биодеструкции, хорошая адгезия, высокие прочностные показатели и др.). Последние можно регулировать путем изменения состава этих полимеров, например, за счет включения пропилена в качестве третьего мономера в полимерную цепь двойного сополимера СО-этилен.

Изучению синтеза тройных сополимеров СО-этилен-пропилен посвящено небольшое количество работ. Обычно эту реакцию проводят в полярных средах (MeOH или его смеси с  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) на палладиевых комплексах  $[\text{PdL}_2\text{X}_2]$  ( $\text{L}_2$  - бидентатный лиганд, X- слабокоординирующий анион), растворимых в реакционной среде. Имеющиеся литературные данные позволяют сделать вывод о том, что синтез продуктов с высоким содержанием пропиленовых звеньев в полимерной цепи на гомогенных катализаторах протекает с невысоким выходом.

В настоящей работе для получения тройных сополимеров СО-этилен-пропилен был использован нанесенный на поликетон палладиевый катализатор. Синтезированные продукты содержали 1-70 % мольн. пропиленовых звеньев, что было достигнуто путем варьирования мольного отношения олефинов в исходной реакционной смеси.

Было проведено исследование влияния температуры процесса и мольного отношения олефинов на скорость реакции. В ряде опытов исследована кинетика сополимеризации. При мольном отношении пропилен к этилену 1,5 и выше реакция продолжается более 5 ч. с мало меняющейся скоростью.

Для синтезированных полимеров были определены температуры плавления и стеклования, а также исследованы деформационные свойства при растяжении в статическом режиме нагружения. Полученные данные свидетельствуют о том, что изученные характеристики продуктов сильно зависят от мольной доли пропиленовых звеньев в полимерной цепи.

### Литература

[1] Белов Г. П., Новикова Е. В. // Успехи химии. 2004. Т. 73. С. 292.

# КИНЕТИКА ЦЕПНОЙ РЕАКЦИИ 2-МЕРКАПТОБЕНЗОТИАЗОЛА С N,N'-ДИФЕНИЛ-1,4-БЕНЗОХИНОНДИИМИНОМ<sup>1</sup>

*\*Гадомская А.В., Варламов В.Т.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*ann.gadomsky@gmail.ru*

Реакции хинонных соединений с тиолами имеют большое значение для теории старения резинотехнических изделий, а также представляют значительный интерес для биохимии и медицины, являясь одним из важнейших факторов токсического действия хиноидных соединений. Такие реакции моделируют разрушительное воздействие на белковые SH-группы лекарственных препаратов хинонного типа. Литературные данные указывали на то, что взаимодействие хинонов с тиолами в сильно полярных средах (ацетонитрил, спирт, их смеси с водой) протекает по гетеролитическому пути. В настоящей работе мы изучили кинетику реакции N,N'-дифенил-1,4-бензохинондиимина (QDI) с 2-меркаптобензотиазолом (RSH) в относительно слабо полярном ароматическом растворителе хлорбензоле. Были получены следующие свидетельства сложного механизма этой реакции в указанных условиях: 1. Кинетические кривые расходования QDI характеризуются экспоненциальным видом только при очень большом избытке концентрации RSH над концентрацией QDI ( $[RSH]_0 > 50 [QDI]_0$ ). При меньшем избытке 2-меркаптобензотиазола на кривых расходования QDI наблюдаются начальные периоды относительно быстрого протекания реакции, после которых скорость реакции существенно снижается. 2. Реакция имеет дробный порядок по 2-меркаптобензотиазолу ( $n_{RSH} = 1.73$ ) и первый порядок по хинондииминому ( $n_{QDI} = 1$ ). Одной из причин сложных кинетических закономерностей реакции мог быть ее цепной механизм. Для проверки этого предположения мы провели опыты в присутствии инициатора тетрафенилгидразина. Было установлено, что в присутствии инициатора скорость расходования QDI существенно возрастает, что является прямым доказательством радикально-цепного механизма. Таким образом, при замене полярных растворителей (спирты, ацетонитрил и т.п.) на относительно слабо полярный хлорбензол происходит замена механизма реакции QDI + RSH с гетеролитического на радикально-цепной. Оценочные расчеты показали, что в условиях эксперимента (343 К, концентрации реагентов =  $10^{-4}$  -  $10^{-3}$  моль л<sup>-1</sup>) длина цепи составляет несколько десятков звеньев.

<sup>1</sup>Работа поддержана грантом в рамках программы № 1 «Теоретическое и экспериментальное изучение природы химической связи и механизмов важнейших химических реакций и процессов» ОХНМ РАН.

# МЕХАНИЗМ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ПЕРЕГРУППИРОВКИ КУРЦИУСА: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ DFT

\* *Забалов М.В., Тигер Р.П.*

*ИХФ РАН, Москва, Россия*

\*zabalov@chph.ras.ru

Термическая перегруппировка Курциуса в присутствии льюисовых кислот ( $\text{BF}_3$ ,  $\text{AlCl}_3$ ,  $\text{SbCl}_5$ ) как катализаторов исследована методом DFT (PBE/TZ2P) на примере бензоилазида. Кислоты Льюиса образуют с бензоилазидом устойчивые комплексы I-VI состава 1:1 и 1:2. Рассчитаны поверхности потенциальной энергии реакции превращения таких комплексов в фенилизоцианат. Энергетические барьеры для реакции с участием катализаторов существенно ниже (напр., на 12.6 ккал/моль при катализе  $\text{AlCl}_3$ ), чем для реакции без катализатора.

	Ea	Eэфф	Ea	Eэфф	Ea	Eэфф
	L = $\text{BF}_3$		L = $\text{AlCl}_3$		L = $\text{SbCl}_5$	
<b>I</b>	27.2	22.8	27.0	2.3	27.2	18.9
<b>II</b>	29.0	23.1	27.8	3.0	28.3	20.0
<b>III</b>	32.7	31.0	28.3	15.2	30.8	29.9
<b>IV</b>	35.3	33.8	40.2	29.2	35.6	34.3
<b>V</b>	26.2	20.5	21.9	-9.5	-	-
<b>VI</b>	27.5	21.1	23.4	-6.7	-	-

Энергия активации уменьшается в ряду льюисовых кислот  $\text{AlCl}_3 > \text{SbCl}_5 > \text{BF}_3$  и такое уменьшение энергии активации коррелирует с уменьшением силы льюисовых кислот. Для трех соединений -  $\text{RCON}_3$  ( $\text{R} = \text{H}, \text{Me}, \text{Ph}$ ), их комплексов с  $\text{BF}_3$  и соответствующих переходных состояний перегруппировки был проведен анализ заселенностей связей по Малликену с использованием метода V3LYP/6-311G\*. Взаимодействие льюисовой кислоты с карбонилазидной группой вызывает ослабление связи  $\text{N1}=\text{N2}$ , что и приводит к более легкому протеканию реакции в присутствии катализатора.

## Литература

- [1] Забалов М. В., Тигер Р. П. // Изв. АН. Сер. хим. 2005. С. 2200.
- [2] Забалов М. В., Тигер Р. П. // Изв. АН. Сер. хим. 2007. С. 1.
- [3] Zabalov M.V., Tiger R.P. // J. Mol. Struct.: THEOCHEM. 2010. V. 962. P. 15.

# СВЕРХБЫСТРАЯ ДИНАМИКА НЕТЕРМИЧЕСКОГО ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНА В «НЕКОНДОНОВСКОМ» ПРИБЛИЖЕНИИ<sup>1</sup>

*Казянова М.В., Щербакова Е.В., \* Михайлова В.А.*

*ВолГУ, Волгоград, Россия*

*\*mixailova\_va@mail.ru*

В последнее десятилетие для целого ряда донорно-акцепторных систем с помощью современных экспериментальных зондов были выявлены новые детали сложной динамики. Это побудило исследователей вновь обратить внимание на ранние нерешенные теоретические вопросы, один из которых – применение кондоновского приближения в теории переноса электрона в конденсированных средах. Хорошо известно [1, 2], что приближение Кондона корректно лишь для жестких или бесструктурных систем. Для макромолекул с гибкой структурой такое предположение может оказаться достаточно грубым.

В рамках данной работы проведено исследование влияния торсиональной моды на динамику нетермического переноса электрона с учетом отклонения от приближения Кондона. Предполагается, что параметр электронной связи зависит от угла скручивания донорного и акцепторного фрагментов относительно мостика. В рамках второго порядка нестационарной теории возмущений по параметру электронной связи [3] получены аналитические выражения для скорости фотоиндуцированного нетермического переноса электрона в возбужденных донорно-акцепторных системах. Выполнена количественная оценка влияния «некондоновских» поправок на динамику распада возбужденного состояния донорно-акцепторных комплексов.

## Литература

- [1] Medvedev E.S., Stuchebrukhov A.A. // Chemical Physics. 2004. V.296. P.181.
- [2] Jang S., Newton M.D. // Journal of Chemical Physics. 2005. V.122. P.024501.
- [3] Ivanov A.I., Potovoi V.V. // Chemical Physics. 1999. V.247. P.245.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (госконтракт 14.740.11.0374).

# ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ РЕАКЦИИ УРЕТАНООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ДИИЗОЦИАНАТОВ С РАЗЛИЧНЫМИ СПИРТАМИ<sup>1</sup>

*\* Картов С.В., Малков Г.В.  
ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия  
\*svkarpov@icp.ac.ru*

В настоящее время существует важная проблема при синтезе «классических» сверхразветвленных полимеров (СРП) - получение и выделение чистого мономера типа  $AB_n$ , содержащего в своем составе функциональные группы с высокой взаимной реакционной способностью. Ранее нами был предложен подход к синтезу уретантриазольных полимеров, решающий проблемы выделения мономера и предполагающий синтез СРП по «one pot» методике: сначала проводится синтез диазиазидоуретанизоцианата (прекурсора) взаимодействием диазидопропанола (ДАПОЛ) с диизоцианатом, далее при обработке прекурсора 2-пропин-1-олом (ПрС) образуется мономер типа  $AB_2$ , который без выделения и дополнительной очистки полимеризуется по реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения с получением СРП. Первые две стадии протекают по реакциям уретанообразования, определению кинетических параметров которых и посвящена данная работа.

В ходе работы изучены кинетические закономерности реакции уретанообразования гексаметилендиизоцианата (ГМДИ) с ДАПОЛ, изопропанолом, ПрС, *n*-пропанолом при комнатной температуре в хлористом метиле ( $[NCO]_0=[OH]_0=2$ ) как в присутствии катализатора дибутилдилаурената олова, так и без катализа. Определен диапазон оптимальных концентраций катализатора в реакции ДАПОЛ+ГМДИ. Оценено влияние функциональных групп ДАПОЛ и ПрС на реакцию уретанообразования. Изучены кинетические закономерности каталитической реакции ДАПОЛ с изофорондиизоцианатом (ИФДИ) при вышеуказанных условиях, определено соотношение реакционной способности изоцианатных групп ИФДИ.

Достоверность теоретического расчета зависимости состава продуктов реакции ДАПОЛ с ГМДИ или ИФДИ от исходного соотношения  $[NCO]_0/[OH]_0$  подтверждена экспериментально.

По результатам проведенных кинетических исследований предложены оптимальные условия синтеза мономеров типа  $AB_2$ .

Авторы выражают свою признательность Бадамшиной Э.Р. и Лодыгиной В.П.

<sup>1</sup>Работа проведена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 09-03-00759-а.)



# РОЛЬ МЕХАНИЗМОВ РЕЛАКСАЦИИ СРЕДЫ В КИНЕТИКЕ ГОРЯЧЕЙ РЕКОМБИНАЦИИ ЗАРЯДОВ<sup>1</sup>

*Кичигина А.О.*

*ВолГУ, Волгоград, Россия*

*annakichigina@yandex.ru*

Обширные исследования горячей люминесценции показали, что релаксация полярной жидкой среды включает не менее двух стадий: инерционную и диффузионную. Присутствие инерционной, гауссовой компоненты в релаксации полярных растворителей было сначала обнаружено в компьютерном моделировании молекулярной динамики и позже многократно подтверждено экспериментально [1]. Разница в инерционном и диффузионном движении должна проявляться в скоростях электронных переходов. Тем не менее до сих пор отсутствуют количественные оценки масштаба проявления этой разницы в кинетике.

В данном сообщении представлены результаты исследования влияния механизма релаксации среды на динамику горячих переходов. Для модели с экспоненциальной релаксацией воспроизведен полученный ранее результат [2]. Для модели с гауссовой релаксацией было получено новое выражение для вероятности горячих переходов. Эти результаты показывают, что вероятность горячих переходов зависит от начального положения волнового пакета для гауссовой функции релаксации, а для экспоненциальной функции релаксации такой зависимости нет. Это связано с тем, что среда с экспоненциальной функцией релаксации не обладает памятью (диффузионное движение).

В реальных средах присутствуют обе компоненты со сравнимыми весами. Расчеты для таких моделей выполнялись численно. В данной работе исследовалась насколько велика разница в кинетике переноса заряда при замене гауссовой компоненты на дебаевскую. Выявлены области параметров, в которых замена гауссовой компоненты релаксации экспоненциальной не приводит к значительным ошибкам.

## Литература

- [1] Horng M. L., Gardecki J. A., Papazyan A., Maroncelli M. // J. Phys. Chem. 1995. V. 99. P. 17311.
- [2] Ivanov A. I., Potovoi V. V. // Chem. Phys. 1999. V. 247. P. 245.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (государственный контракт № П1145).

## ВОДА, КАК ИНДИКАТОР СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ ЧАСТИЦ СФЕРИЧЕСКОГО ВЫСОКОДИСПЕРСНОГО АЛЮМИНИЯ

*\* Коновалов А.С., Громов А.М., Гутнева Е.С.,  
Певченко Б.В.*

*ОАО ФНПЦ Алтай, Бийск, Россия*

*\*post@frpc.secna.ru*

Металлический алюминий при контакте с азот-кислородными средами достаточно быстро покрывается защитной пленкой оксидов, гидроксидов и их производных, толщина которых достигает 0,1 – 2нм, пленка растет в зависимости от окружающих условий.

Учитывая, что химические свойства порошка определяются свойствами оксидной пленки на поверхности алюминия, были проведены работы по оценке кислотно-основных свойств сферического порошка алюминия.

Для характеристики кислотно-основных свойств порошка алюминия в работе был использован рН-метрический метод. Взаимодействие порошкообразного алюминия с водой – многостадийный процесс, включающий образование интермедиатов ( $AlH_3$ ,  $AlOH$ ), которые вступают в реакции между собой и компонентами раствора, и сопровождающийся изменением значения рН раствора.

Навеску алюминия помещали в дистиллированную воду объемом 200мл и проводили измерение кислотности среды во времени с помощью рН-метра, с использованием хлорсеребряного электрода - в качестве электрода сравнения и стеклянного электрода - в качестве индикаторного.

Полученные кривые отражают две стадии. Первая – характеризуется ступенчатым понижением рН среды, вторая – повышением рН среды. На первой стадии форма кривых не зависит от массы навески. При этом можно выделить три ступени, которые характеризуются различной интенсивностью процесса снижения рН-суспензии. Возникновение этих ступеней мы связываем с адсорбцией из раствора ионов  $OH^-$  на неоднородной поверхности частиц порошка алюминия, которая сформирована пленкой из оксидов алюминия. На второй стадии идет подщелачивание водной среды за счет непосредственного взаимодействия активного алюминия с водой.

Таким образом, изучая процесс взаимодействия порошка алюминия с водой при помощи рН-метра, можно охарактеризовать адсорбционные свойства поверхности частиц алюминия и прочность оксидной пленки.

# ХЕМОСОРБЦИЯ И ЭЛЕКТРООКИСЛЕНИЕ ЭТАНОЛА НА РУТЕНИЙСОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРАХ В ЩЕЛОЧНОЙ СРЕДЕ

*Корчагин О.В.*

*ИФХЭ РАН, Москва, Россия*

*oleg-kor83@mail.ru*

Настоящая работа посвящена комплексному развитию электрокатализа реакции окисления этанола на неплатиновых катализаторах Ru-MO<sub>X</sub>/C и включает исследование влияния природы носителя на активность системы Ru-VO<sub>X</sub>/C, а также разработку модели адсорбционного центра катализаторов Ru/C и Ru-MO<sub>X</sub>/C (M=V, Ni).

Оптимизированы состав активной фазы катализатора Ru-VO<sub>X</sub>/C и тип углеродного носителя. Наиболее высокую активность в модельных условиях показал катализатор состава 30 мас.% (Ru+V) при мольном соотношении Ru:V=3:1, сформированный на многослойных нанотрубках. Активность данного катализатора превосходит как характеристики коммерческого платинового катализатора 20 мас.% Pt (E-TEK), так и монорутениевого катализатора. Максимальная плотность мощности прямого этанольного ТЭ с анодом на основе оптимизированного катализатора составила 43 мВт/см<sup>2</sup> при температуре 80°С, что соответствует уровню характеристик платиновых катализаторов.

Методами нестационарной вольтамперометрии изучены закономерности хемосорбции и дегидрирования этанола на рутенийсодержащих катализаторах, сформированных на саже XC-72. Зависимости адсорбции этанола от его концентрации и времени адсорбции в области средних заполнения формально описываются уравнениями Темкина и Рогинского-Зельдовича, соответственно. С ростом содержания промотирующего компонента в катализаторе повышается энергетическая неоднородность активного компонента (рутений). Для катализаторов 15 мас.% Ru/C и Ru<sub>60</sub>V<sub>40</sub>O<sub>X</sub>/C (15 мас.% Ru) рассчитаны количества электронов, переданные на одно адсорбционное место рутения на стадиях дегидрирования и окисления продуктов хемосорбции. На основании анализа результатов адсорбционных измерений и данных по кинетике и глубине электроокисления, полученных в квазистационарных условиях, высказано предположение о двухточечной адсорбции этанола на бинарных катализаторах, что определяет путь дальнейшего окисления адсорбатов через разрыв C-C связи. Для монорутениевого катализатора предложена модель линейной адсорбции с образованием слабосвязанных частиц, окисляющихся до ацетальдегида и уксусной кислоты (в форме ацетата).

# ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНО-КИНЕТИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ РЕАКЦИИ $\text{CO} + \text{NO} + h\nu \rightarrow \frac{1}{2}\text{N}_2 + \text{CO}_2$ НА $\text{TiO}_2$ НОМБИФИНЕ N<sup>1</sup>

*\* Михайлов Р.В., Глазкова Н.И.*

*СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия*

*\* ruslan1978@mail.ru*

Ранее [1, 2] нами было показано протекание реакции  $\text{CO} + \text{NO} + h\nu \rightarrow \frac{1}{2}\text{N}_2 + \text{CO}_2$  (1) на  $\text{TiO}_2$  Degussa P-25 под действием УФ и видимого света. Реакция (1) протекает в 2 этапа: 1) фотоадсорбция NO, идущая с участием фотогенерированных электронов и сопровождающаяся появлением промежуточного продукта  $\text{N}_2\text{O}$ ; 2) поглощение  $\text{N}_2\text{O}$  и выделение  $\text{N}_2$  в газовую фазу, требующее участия фотогенерированных дырок. Второй продукт  $\text{CO}_2$  остается на поверхности  $\text{TiO}_2$  и может быть выделен при нагревании до 450-500 К [1]. Был предложен механизм реакции (1) [1, 2]. Целью данной работы были: выявление спектрально-кинетических особенностей реакции (1) на высокодисперсном  $\text{TiO}_2$  Номбифине N (анатаз,  $S=320 \text{ м}^2/\text{г}$ , средний размер частиц  $d \sim 6 \text{ нм}$ ) при облучении монохроматическим светом в диапазоне длин волн 300 - 440 нм; и анализ промежуточных продуктов при различных исходных соотношениях CO:NO. Исследования проводились методами масс-спектрометрии и ТПД спектроскопии, описанными ранее [1].

Установлено, что наиболее выгодное соотношение вкладов носителей электронного и дырочного типов достигается при облучении светом с  $\lambda=404 \text{ нм}$ , т.е. за краем поглощения  $\text{TiO}_2$  (анатаз), что связано, по-видимому, с особенностями фотогенерации и релаксации носителей в этой области. Промежуточными продуктами, адсорбированными на  $\text{TiO}_2$ , являются  $\text{N}_2\text{O}$ , NO и  $\text{CO}_2$ . Установлено влияние исходного соотношения CO:NO на кинетику реакции (1) и соотношения промежуточных продуктов, адсорбированных на поверхности  $\text{TiO}_2$ . Предложен механизм формирования промежуточных продуктов.

## Литература

- [1] Lisachenko A.A., Mikhailov R.V., Basov L.L., Shelimov B.N., Che M. // J. Phys. Chem. C, 2007, V. 111, 14440.
- [2] Mikhaylov R.V., Lisachenko A.A., Shelimov B.N., Kazansky V.B., Martra G., Alberto G. and Coluccia S. // J. Phys. Chem. C, 2009, V. 113, 20381.

---

<sup>1</sup>Работа поддержана грантом РФФИ-09-03-00795-а.

## ЭНЕРГОЁМКИЕ АЛИЦИКЛИЧЕСКИЕ МОЛЕКУЛЫ В ПОЛЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

<sup>\*2</sup>*Ней В.Т.*, <sup>1</sup>*Самойлов В.О.*, <sup>1</sup>*Борисов Р.С.*, <sup>1</sup>*Щапин И.Ю.*  
<sup>1</sup>*ИИХС РАН, Москва, Россия*, <sup>2</sup>*РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

*\*shchapin@yandex.ru*

Алициклическими называют соединения, которые состоят только из атомов углерода и водорода. При образовании геометрически и стереически «напряжённых» молекул запасается энергия, которая может высвободиться в разных химических реакциях. В катализе в качестве промежуточных соединений часто рассматривают циклопропановые соединения. В курсах фотохимии привычной «академической» системой является циклобутан. Циклопентановые, циклопентеновые кольца, в сочетании с циклогексановым кольцом в энергетически невыгодной конформации «ванна», входят в состав многих бициклических молекул, например норборнанового и норборненового рядов, которые интересны своей термохимией. На обсуждение в рамках конференции выносятся: (1) систематизация литературных данных по строению и химическому поведению энергоёмких алициклических молекул при воздействии на них гамма-, рентгеновского и электронного излучения (ЭПР, хроматография, масс-спектрометрия) и (2) аналогичные собственные результаты для ранее не изученных систем.

# МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ ТРИОКСИДА ВОДОРОДА<sup>1</sup>

*\* Низовцев А.С., Бакланов А.В.  
ИХКГ СО РАН, Новосибирск, Россия  
\* nizovtsev@kinetics.nsc.ru*

Триоксид водорода (НОООН) играет важную роль в химии атмосферы, биологии и окружающей среде. Предполагается, что НОООН является ключевым интермедиатом в реакциях озона с различными органическими соединениями, а также в конверсии синглетного кислорода и воды в перекись водорода антителами.

Недавно Энгдаль и Неландер показали, что значительные концентрации НОООН образуются при фотолизе смеси озона и перекиси водорода в аргоновых матрицах [1]. Авторы объяснили образование НОООН внедрением атома  $O(^1D)$  в связь ОН в НООН.

Несмотря на то, что механизм реакции был предложен [2], он сильно отличается от начальных предположений.

В данной работе на основании результатов вычислений методами связанных кластеров будет предложена альтернативная схема образования НОООН через метастабильный комплекс, который, вероятно, мог образоваться в условиях проведенного эксперимента. Возможные каналы распада этого комплекса также будут рассмотрены.

## Литература

- [1] Engdahl A., Nelander B. // Science. 2002. V. 295. P. 482.
- [2] Xu X., Goddard W.A. // Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2002. V. 99. P. 15308.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 09-03-00310а) и Министерства образования и науки РФ (контракт 14.740.11.0722).

**РАСЧЕТ МНОГОКОНФИГУРАЦИОННЫМИ  
МЕТОДАМИ РЕАКЦИИ ОЗОНОЛИЗА  
ДЕФОРМИРОВАННОГО И НЕДЕФОРМИРОВАННОГО  
ЦИС- И ТРАНС-2-БУТЕНА**

\*<sup>1</sup>Овчинников В.А., <sup>2</sup>Крисяк Б.Э., <sup>1</sup>Майоров А.В.,  
<sup>1</sup>Попов А.А.

<sup>1</sup>ИБХФ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия  
\*fzhim@rambler.ru

В работе на примере первой стадии озонлиза 2-бутена подробно исследуются сечения профилей поверхности потенциальной энергии (ППЭ) для недеформированного и деформированного 2-бутена, полученные комбинациями однодетерминантных и многодетерминантных методов в различных активных пространствах. Деформацию в задачу вводили изменением длины двойной С=С связи. Начальная оптимизированная геометрия вдоль всей координаты реакции ищется методами ВЗЛУР, MCSCF в активном пространстве 10 электронов на 9 орбиталях и 14 электронов на 11 орбиталях, далее методом MCSCF с поправками MP2 строится сечение ППЭ вдоль координаты реакции.

В работе показано как работают комбинации методов для симметричного (Криге) и несимметричного (Демур) присоединения озона к 2-бутену. Получены зависимости энергии активации и константы скорости от деформации. Результаты анализируются в рамках разработанного ранее подхода, позволяющего связать изменение  $E_a$  при деформации с длиной и жесткостью исходного и переходного состояний. Энергии активации и константы скорости реакции озона с ненатянутым цис- и транс-2-бутеном для обоих механизмов реакции сравниваются с экспериментальными данными.

# ГАЛОГЕНИД-АНИОНЫ - ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ НЕРАДИКАЛЬНОГО КИСЛОТНО-КАТАЛИЗИРУЕМОГО ОКИСЛЕНИЯ ЭПОКСИДА СТИРОЛА В СПИРТОВЫХ РАСТВОРАХ

<sup>2</sup>Петрова Т.А., \*<sup>1</sup>Петров Л.В., <sup>1</sup>Психа Б.Л.,

<sup>1</sup>Соляников В.М.

<sup>1</sup>ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия, <sup>2</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия

\*plv@icp.ac.ru

Исследование химического превращения эпоксида стирола (ЭС) в присутствии кислорода в слабокислой полярной среде позволило выявить ряд необычных результатов, предполагающих нерадикальную реакцию окисления двойной системы (ЭС + кислота) по механизму с образованием активной промежуточной частицы - фенилкарбена. В присутствии инициатора свободных радикалов эпоксид стирола медленно окисляется по радикально-цепному механизму даже при высокой температуре 413К. В отсутствие радикального инициатора при 343 К введение в растворы ЭС (ацетонитрил или смешанный растворитель из 90% об. трет.бутанола и 10% об. хлорбензола) каталитических количеств пара-толуолсульфоукислоты (ТСК), серной, хлорной кислот, наряду с быстрым расходом ЭС, вызывает интенсивное поглощение молекулярного кислорода. В атмосфере аргона такая система (при совместном присутствии эпоксида и кислоты) в десятки раз быстрее разрушает вводимые в нее ROOH различного строения, чем при кислотном катализированном распаде гидропероксидов в этих условиях. Обнаружено и изучено явление торможения процессов, протекающих в двойных системах малыми количествами галогенидов лития, натрия, калия и органических аммонийных солей. Результаты по изучению эффекта ингибирования окисления противоречат версии наличия в системе оксипероксидных радикалов, обладающих двойственной окислительно-восстановительной функцией. Реакцию окисления кислородом двойной системы ЭС + ТСК тормозят соли галогенидов иода, брома, хлора и фтора. Природа катиона для эффекта торможения малосущественна. Важной особенностью является многократность ингибирующего действия галогенид-ионов. Предполагается, что причина торможения разных каналов превращения (основного и связанного с поглощением кислорода) заключена в возможности галогенид-ионов замедлять гетеролиз ЭС, основной маршрут расходования.



# ПРОЯВЛЕНИЕ РЕЛАКСАЦИИ ВЫСОКОЧАСТОТНЫХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ МОД В ДИНАМИКЕ ОБРАТНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ ПЕРЕХОДОВ<sup>1</sup>

*Рогозина М.В.*

*ВолГУ, Волгоград, Россия  
marinkarogozina@yandex.ru*

Современная фемтосекундная лазерная техника позволяет исследовать динамику молекулярных систем. Эти исследования закладывают научные основы создания элементной базы молекулярной электроники. Уже созданы молекулярные переключатели, которые представляют собой триады, включающие молекулу цинк-порфирина и ковалентно связанные с ним два акцептора.

В данном докладе представлены результаты исследования влияния релаксации высокочастотных (ВЧ) колебательных мод на динамику горячих переходов. Показано, что наряду с энергетическими параметрами молекулярной системы на выход термализованных продуктов разделения зарядов (РЗ) из  $S_2$  большое влияние оказывают динамические характеристики системы. В области низкой экзотермичности реакции переноса электрона уменьшение времени релаксации ВЧ колебательной моды приводит к уменьшению термализованных продуктов РЗ; в области высокой экзотермичности предсказывается обратная зависимость. Экспериментальные исследования кинетики РЗ из  $S_2$  были выполнены для серии производных цинк-порфиринов, в которых в качестве электронных акцепторов выступали имидные группы [1].

В работе была рассчитана динамика распада состояния  $S_2$ , заселения состояний с разделенными зарядами и  $S_1$  в рамках обобщенной стохастической модели [2]. Получено хорошее согласие с экспериментальными данными [1]. Показано, что выход продуктов фотоиндуцированного РЗ изменяется в несколько раз при вариации времени релаксации ВЧ колебательной моды.

## Литература

- [1] Mataga N., Chosrowjan H., Taniguchi S., Shibata Y., Yoshida N., Osuka A, Kikuzawa A. // J. Phys. Chem. 2002. A. V.106. P.12191.
- [2] Feskov S.V., Ionkin V.N., Ivanov A.I. // J.Phys. Chem. A. 2006. V.110. P.11919. 2006.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (государственный контракт № 14.740.11.0374).

# ОКИСЛЕНИЕ ВОДЫ СОЕДИНЕНИЯМИ ЦЕРИЯ (IV), КАТАЛИЗИРОВАННОЕ ДВУХЪЯДЕРНЫМИ И ТРЕХЪЯДЕРНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ РУТЕНИЯ<sup>1</sup>

\* *Темнова М.Л., Джабиева З.М.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

\* *temnovam@gmail.com*

Изучены кинетика и механизм действия рутениевых катализаторов окисления воды для «искусственного фотосинтеза» (ИФ), которые не содержат органических лигандов: биядерный  $K_4[Ru_2(SO_4)_2(\mu-SO_4)_2(\mu-O)_2] \cdot 2H_2O$  (**1**) и трехъядерный  $(NH_3)_5RuORu(NH_3)_4ORu(NH_3)_5^{6+}$  (Ru-red, **2**) комплексы.

Ранее был изучен т.н. «голубой димер» **3**, ионы  $[(bpy)_2Ru(OH_2)]_2O^{4+}$  которого являются катализаторами окисления воды одноэлектронными окислителями  $Ce^{4+}$  и  $bpy_3Ru^{3+}$ . Низкая активность этих комплексов связана с наличием органических лигандов. Кроме того, стабильность этих катализаторов низка из-за лабильности связи  $Ru-O-Ru$  в димере **3**. Комплексы **1**, **2** более привлекательны в качестве катализаторов окисления для ИФ.

Мы детально изучили кинетику самовосстановления комплексов **1**, **2**. В элементарном внутрикластерном акте с участием димера **1** четыре молекулы  $H_2O$  окисляются в циклическую молекулу  $O_4$ , которая распадается на две молекулы  $O_2$ . То есть для самовосстановления катализатора **1** необходимо объединение двух димеров в линейный тетрамер. А для катализированного окисления воды одноэлектронными окислителями  $Ce^{4+}$  необходимо четыре иона  $Ce^{4+}$ , чтобы вернуть в рабочее состояние утративший активность тетрамер  $(Ru^{III}Ru^{III})_2$ .

Для комплекса **2** было установлено, что он получается при одноэлектронном восстановлении катиона  $(NH_3)_5RuORu(NH_3)_4ORu(NH_3)_5^{7+}$  (**2+**) путём окисления иона  $OH^-$ . В координационной сфере кластера, составленного из четырёх **2+**, две молекулы  $H_2O$  окисляются до молекулы  $O_2$ . А каталитическое окисление воды ионами  $Ce^{4+}$  осуществляется в координационной сфере этого же двенадцатиядерного кластера после того, как четыре иона  $Ce^{4+}$  окислят четыре **2** в четыре **2+**.

Таким образом, изученные нами катализаторы **1**, **2** представляют собой тетраядерный  $(Ru^{IV}Ru^{IV})_2$  и додекаядерный  $(Ru^{IV}Ru^{III}Ru^{IV})_4$  кластеры. Эти комплексы рутения самоорганизуются и в более крупные кластеры, обладающие необходимым количеством окислительных эквивалентов для восьмиэлектронного окисления воды до молекулы оксозона  $O_4$ .

<sup>1</sup>Работа поддержана грантом Отделения химии и наук о материалах РАН.

# ФОТОАКТИВАЦИЯ КИСЛОРОДА НА ПОВЕРХНОСТИ САМОСЕНСИБИЛИЗИРОВАННОГО НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО $\text{TiO}_2\text{-TiO}_{2-x}$ <sup>1</sup>

Титов В.В., \* Михайлов Р.В., Лисаченко А.А.

СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

\*ruslan1978@mail.ru

$\text{TiO}_2$  широко используется для преобразования УФ составляющей солнечной энергии в электрическую и химическую. Для сенсibilизации  $\text{TiO}_2$  к видимой области используют допирование различными элементами, молекулами красителей, составлением композитов  $\text{TiO}_2$  - узкозонный полупроводник. Нами предложен способ самосенсibilизации фотокатализатора  $\text{TiO}_2$  путем его восстановления с созданием собственных центров окраски (F-центры,  $\text{Ti}^{3+}$ ). Показано, что в окислительно-восстановительной реакции  $\text{CO} + \text{NO} + h\nu \rightarrow \frac{1}{2}\text{N}_2 + \text{CO}_2$  квантовый выход в видимой области в 6 раз выше, чем в УФ [1].

Цель настоящей работы - исследовать устойчивость этих центров  $\text{TiO}_2$  Degussa P-25 в условиях фотоактивированного окисления в атмосфере  $\text{O}_2$ . Используются методы масс-спектрометрии и термодесорбционной спектроскопии [1]. Для выявления атомно-молекулярных процессов с участием кислорода на поверхности  $\text{TiO}_{2-x}$  использовали изотопобогащенные смеси  $\text{O}_2$  ( $m/e = 32, 34, 36$ ).

Обнаружено, что облучение  $\text{TiO}_2$  в вакууме приводит к ассоциативной десорбции кислорода с образованием на поверхности кислородных вакансий. Возможна фотодесорбция молекул из формы  $\text{O}_2^-$ . При облучении УФ и/или видимым светом в кислороде наблюдаются его фотоадсорбция с заселением атомарных форм адсорбции, а также замещение  $\text{O}_2^-$  без межмолекулярного обмена атомами. Облучение в кислороде также сопровождается гетерообменом через трехатомный комплекс  $\text{O}_3^-$  и связанным с ним интенсивным гомообменом, являющимся результатом многократного взаимодействия молекул  $\text{O}_{2gas}$  со структурными фотоиндуцированными долгоживущими анионами  $\text{O}_{struct}^-$ .

Таким образом, даже в условиях фотоокисления в кислороде на поверхности сохраняется концентрация активных центров (F-центры,  $\text{Ti}^{3+}$ ), т.е.  $\text{TiO}_{2-x}$  сохраняет активность в видимой области.

## Литература

- [1] Lisachenko A.A., Mikhailov R.V., Basov L.L., Shelimov B.N., Che M. // J. Phys. Chem. C, 2007, V. 111, 14440.

<sup>1</sup>Работа поддержана грантом РФФИ-09-03-00795-а.

# ВОССТАНОВЛЕНИЕ КИСЛОРОДА И ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА НА РС-AU И КАТАЛИЗАТОРЕ 20AU/C. МЕХАНИЗМ АВТОДЕАКТИВАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ

<sup>\*2</sup> *Трипачев О.В.*, <sup>1</sup> *Андоралов В.М.*

<sup>1</sup> *Malmö University, Malmö, Швеция*, <sup>2</sup> *ИФХЭ РАН, Москва, Россия*  
*\*tochem@rambler.ru*

В последние годы все активнее ведется разработка различных наносистем на основе золота. Это катализаторы для топливных элементов - наночастицы различного размера, комбинированные системы с оксидами, core-shell и сплавные структуры. Кроме того, золото является важной составляющей биотопливных элементов, био- и иммуносенсоров. В связи с широкой применением золота, представляет большой интерес изучение механизма электрокаталитических реакций на нем, в частности, реакция электровосстановления кислорода.

На основании ЦВА установлен порядок реакции по концентрации ионов водорода, имеющий значение, близкое 0,5. Катализатор, в сравнении с pc-Au, показал более высокую активность во всем диапазоне рН, что отражается в смещении в анодную сторону потенциалов полуволн 2- и 4-электронного на величину 70-200 мВ и появлении второго наклона на графике зависимости  $E_{1/2}$ -рН. Изменение характера рН-зависимости говорит о существенном влиянии на восстановление кислорода размерного эффекта.

В ходе анализа литературы и серии экспериментов установлено, что поверхность поликристаллического золота существует в двух состояниях - стабильном и метастабильном – с различной активностью. Методом импеданса было исследовано поведение поликристаллического золота в кислой и щелочной среде.

Анализ спектра импеданса на золоте в 1М NaOH показал, что в области потенциалов первой волны индуктивный элемент импеданса связан с химическим диспропорционированием поверхностных пероксогрупп в момент образования. Структура спектра импеданса не зависит от концентрации пероксоаниона, что говорит об отсутствии адсорбционного равновесия между поверхностными пероксочастицами и пероксоанионом в растворе. При ионизации поверхностных пероксогрупп до пероксоаниона происходит быстрая десорбция последних в раствор. Некоторая часть пероксогрупп успевает диспропорционировать до ионизации, это приводит к некоторому увеличению предельного диффузионного тока поляризационной кривой по сравнению с током, рассчитанным для двухэлектронного процесса и образованию индуктивной полудуги на годографе импеданса в области низких частот.

# ОКИСЛЕНИЕ ВОДЫ ОДНОЭЛЕКТРОННЫМИ ОКИСЛИТЕЛЯМИ В ПРИСУТСТВИИ ТЕТРАЯДЕРНОГО РУТЕНИЕВОГО КОМПЛЕКСА<sup>1</sup>

\*<sup>2</sup>*Шматко Н.Ю.*, <sup>1</sup>*Джабиева З.М.*

<sup>1</sup>*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия, <sup>2</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия*

\**timur@cat.icp.ac.ru*

Среди различных методов утилизации солнечной энергии (СЭ) биомиметический способ является одним из перспективных путей решения энергетических проблем. Способ этот состоит в фотоиндуцированном разложении  $H_2O$  на кислород и водород (химическое топливо) в фотокаталитических преобразователях световой энергии в энергию химического топлива («искусственный фотосинтез» (ИФ)). Одной из ключевых стадий процесса фотокаталитического разложения воды помимо фотостимулированного разделения и стабилизации зарядов является стадия формирования молекулярного кислорода при окислении воды одноэлектронными окислителями (дырками), например, ионами  $Ce^{4+}$  или  $bpy_3Ru^{3+}$ . Стадия формирования молекулярного кислорода считается наиболее сложной стадией в ИФ. К настоящему времени изучены многие типы катализаторов окисления  $H_2O$  на основе комплексов переходных металлов:  $Mn$ ,  $Co$ ,  $Ni$ ,  $Ru$  и др. Одним из наиболее перспективных катализаторов окисления воды является тетрарутениевый комплекс  $L_2Ru_4$ , содержащий в качестве лигандов  $L$  полиоксометаллаты.

Мы изучили кинетику окисления воды ионами  $Ce^{4+}$  в присутствии  $L_2Ru_4$ . В водной среде скорость окисления воды пропорциональна квадрату концентрации  $Ce^{4+}$ . На образование одной молекулы  $O_2$  необходимо истратить 4 иона  $Ce^{4+}$ . Следовательно, в этих условиях соединения церия выступают в качестве четырёхэлектронных окислителей, т.е. окислителями являются не моноионы  $Ce^{4+}$ , а тетрарутенные частицы  $(Ce^{4+})_4$ , поскольку в изученном концертном многоэлектронном элементарном акте осуществляется восьмиэлектронное окисление четырёх молекул воды до оксозона  $O_4$ . В кислой среде зависимость скорости окисления воды прямо пропорциональна концентрации  $L_2Ru_4$ . Однако, поскольку продуктом окисления воды оказывается оксозон  $O_4$ , а не кислород, как предполагали исследователи, изучавшие этот комплекс в качестве катализатора, процесс этот не четырёх-, а восьмиэлектронный.

---

<sup>1</sup>Работа поддержана грантом ОХНМ РАН.

# ПЕРВИЧНЫЕ ИНТЕРМЕДИАТЫ В ФОТОХИМИИ ГЕРБИЦИДА 2,4,5-ТРИХЛОРФЕНОКСИУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ<sup>1</sup>

*\* Юркова М.П., Поздняков И.П., Плюшкин В.Ф.,  
Гривин В.П.*

*ИХКГ СО РАН, Новосибирск, Россия*

*\*yurkova@kinetics.nsc.ru*

2,4,5-трихлорфеноксиуксусная кислота (2,4,5-Т) является одним из широко применяемых гербицидов в сельском хозяйстве, и ее мировое производство составляет десятки тысяч тонн в год. 2,4,5-Т является токсичным веществом, и его поступление в водоемы ведет к ухудшению качества питьевой воды. Фотохимический метод является одним из перспективных подходов к очистке водных систем от токсичных органических веществ. В докладе представлены данные об исследовании первичных стадий фотодегградации 2,4,5-Т методами стационарного и наносекундного лазерного (266 нм) импульсного фотолиза. Эксперименты проводились в слабощелочных водных растворах (рН 9-10) в диапазоне концентраций кислоты 0.02 – 0.2 ммоль/литр.

Показано, что УФ-возбуждение 2,4,5-Т приводит к ее фотоионизации с образованием пары гидратированный электрон – катион-радикал, что является характерной особенностью фотохимии хлорфенолов. Первый интермедиат характеризуется полосой поглощения с максимумом на 720 нм, катион-радикал демонстрирует полосу поглощения с максимумом на 540 нм. Выход интермедиатов демонстрирует нелинейную зависимость от интенсивности возбуждающего импульса, что указывает на вклад двухфотонной ионизации при высоких мощностях лазерного импульса. Квантовый выход фотоионизации равен 0.021 при энергии возбуждения 0.25 Дж/см<sup>2</sup>. Основными каналами гибели гидратированного электрона в обескислороженных растворах являются захват 2,4,5-Т ( $k = 7 \cdot 10^9$  М<sup>-1</sup>с<sup>-1</sup>) и рекомбинация с катион-радикалом. В присутствии кислорода гидратированный электрон преимущественно конвертируется в O<sub>2</sub>-• радикал. Катион-радикал 2,4,5-Т подвергается гидролизу молекулой воды ( $k = 10^7$  с<sup>-1</sup>) с образованием долгоживущего феноксильного радикала. Последняя частица гибнет, по-видимому, в реакции рекомбинации с образованием конечных продуктов фотолиза 2,4,5-Т.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты №№ 09-03-00330, 11-03-00268) и Программы интеграционных проектов СО РАН 2009 – 2011 гг. (грант № 70).

# **СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

# ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТНОСТИ СТРУКТУРЫ $\text{Li}_2\text{TiO}_3$ НА РЕАКЦИОННУЮ АКТИВНОСТЬ СОЕДИНЕНИЯ<sup>1</sup>

\* *Бакланова Я.В., Таракина Н.В., Максимова Л.Г.,  
Денисова Т.А.*

*ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

\* *baklanovay@ihim.uran.ru*

Исследования последнего десятилетия выявили факт более высокой реакционной активности низкотемпературных модификаций металлатов лития элементов IV группы. Ранее нами было показано, что в зависимости от условий получения соединений  $\text{Li}_2\text{TiO}_3$  полнота протекания реакции обмена ионов лития на ионы водорода в кислых водных растворах различна. Полный обмен ионов возможен лишь при использовании титаната лития, полученного при относительно низких температурах 600-700°C. При этом формируется новый кристаллический оксигидроксид состава  $\text{TiO}(\text{OH})_2$ , который проявляет высокую сорбционную активность по отношению многозарядным катионам, в том числе радиоактивным. Реакционная активность титаната лития, полученного при высоких температурах существенно ниже [1].

Уточнение порошковых рентгенограмм показало [2], что различие кристаллических структур низко- и высокотемпературных модификации  $\text{Li}_2\text{TiO}_3$  связано с наличием дефектов упаковки смешанных  $\text{LiTi}_2$ -слоев вдоль направления с.

Настоящая работа предпринята с целью установления путей формирования кристаллической структуры титаната лития с различной степенью дефектности. На примере исследования кинетики обмена ионов  $\text{Li}^+$  на  $\text{H}^+$  установлено, что варьирование методов и температуры синтеза позволяет управлять количеством планарных дефектов и, как следствие, скоростью реакции ионного обмена. Полученные закономерности могут быть распространены на широкий круг металлатов лития  $\text{Li}_2\text{MO}_3$  ( $M = \text{Zr}, \text{Hf}, \text{Mo}, \text{Pd}, \text{Pt}, \text{Ir}, \text{Ru}, \text{Sn}, \text{Pb}$ ) с дефектной кристаллической структурой.

## Литература

- [1] Денисова Т.А., Максимова Л.Г., Поляков Е.В., и др. // Журнал неорганической химии. 2006. Т. 51. № 5. С. 757-766.
- [2] Tarakina N.V., Neder R.B., Denisova T.A., et al. // Dalton Transactions. 2010. V. 39. P. 8168–8176.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке грантов УрО РАН (М-10-Б, № 09-С-3-1006).



# ЗЕРНОГРАНИЧНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД СМАЧИВАНИЯ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ ЦИРКОНИЯ<sup>1</sup>

*Горнакова А.С.*

*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия*

*alenahas@issp.ac.ru*

Границы зерен - в отличие от внешних поверхностей - глубоко «спрятаны» внутри материала. Поэтому двумерные фазовые переходы вначале были обнаружены на внешних поверхностях и лишь значительно позже - на внутренних границах раздела. При этом термодинамически они подобны: если обычные трехмерные фазы характеризуются свободной энергией, приходящейся на единицу объема, то фазы на внешних и внутренних границах раздела описываются свободной энергией, приходящейся на единицу площади поверхности.

Исследования последних лет показали, что на границах зерен могут образовываться прослойки равновесных фаз макро- и микроскопической толщины. Эти фазы могут быть как «обычными», существовать в объеме, так и специфическими зернограничными, устойчивыми только на границах раздела. Существование таких прослоек определяется фазовыми переходами смачивания (как жидкой, так и твердой фазой).

Сплавы цирконий-ниобий широко используются в современном реакторном машиностроении. Они обладают высокой температурой плавления, низким сечением захвата нейтронов, достаточной прочностью при высокой температуре, приемлемой коррозионной стойкостью в водных растворах, а также стабильностью микроструктуры и устойчивостью к облучению. Эти важные преимущества, однако, сочетаются с целым рядом существенных недостатков: сложностями производства и механической обработки, связанными с кристаллографической анизотропией гексагонального плотноупакованного альфа-Zr, невысокой прочностью при ползучести выше температуры реактора (300 С) и т.д. К счастью, с этими недостатками можно бороться, зная физику процессов деградации и управляя микроструктурой материала. Для достижения оптимальной эффективности во время службы реакторных материалов очень важно понимать их поведение при термомеханическом воздействии и коррозии. Для наилучшего понимания процессов и улучшения свойств материалов необходимо знать соответствующие фазовые диаграммы и особенности фазовых превращений. Это относится как к объемным диаграммам и превращениям, так и к недавно обнаруженным зернограничным превращениям.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 09-02-00294).

## НОВЫЕ ДАННЫЕ О СТРУКТУРЕ КАРБИДА БОРА С НИЗКОЙ КОНЦЕНТРАЦИЕЙ УГЛЕРОДА

*\*Ковалев И.Д., Коновалихин С.В.*

*ИСМАН, Черногловка, Россия*

*\*i2212@yandex.ru*

Карбид бора является интересным соединением для науки и техники, так как обладает уникальными физико-химическими свойствами. Изучению его структуры посвящено более 40 публикаций, начиная с 1940 по 2010 годы [1]. Тем не менее по-прежнему нет полной ясности как с составом икосаэдра B<sub>12</sub>, так и с составом линейной группы C-B-C в отношении замещения атомов бора атомами углерода в этой фазе переменного состава.

Целью работы являлось изучение изменений кристаллической структуры карбида бора, полученного методом СВС, с различным содержанием углерода. Исследования проводились методом рентгенофазового анализа с использованием внутреннего эталона.

Впервые методом СВС получены порошки карбида бора в диапазоне 5-30 ат.% С в шихте и выделен интервал значимых изменений параметров ячейки от 7 до 22 %, в котором обнаруживается дополнительное деление на зоны. Установлено, что имеющиеся в литературе данные [2] по параметрам ячейки плохо согласуются между собой, указывая на необходимость объяснения этих рассогласований со структурных позиций (примеси, условия получения, упорядочение). Вероятной причиной рассогласования данных являются неоднозначные процессы многовариантного упорядочения при замещении бора углеродом в структуре карбида бора.

### Литература

- [1] Коновалихин С.В., Пономарев В.И., // Журнал Неорганич. Химии. 2009. т. 54. с. 1.
- [2] G.H. Kwei, B. Morozin, // J. Phys. Chem. 1996. V. 100. P. 8031.

# УСОВЕРШЕНСТВОВАННЫЙ СПОСОБ РАСЧЕТА ДОЛИ ИОНООБМЕННОЙ И ИНЕРТНОЙ СОСТАВЛЯЮЩИХ ПОВЕРХНОСТИ ГЕТЕРОГЕННЫХ ИОНООБМЕННЫХ МЕМБРАН

*\*Кранина Н.А., Васильева В.И., Сирота Е.А.,  
Недосекин Ю.В., Малыгин М.Д.  
ВГУ, Воронеж, Россия  
\*NatalyaKranina@gmail.com*

В настоящее время транспортные и равновесные свойства ионообменных мембран рассматривают с учётом их структурной неоднородности. Определение доли проводящей и инертной составляющих поверхности гетерогенных мембран проводили согласно методике [1] на основании экспериментальных результатов, полученных с помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Обычно для определения площадей каждой из фаз на микрофотографиях поверхностей исследуемых мембран использовалась стандартная компьютерная программа Corel PHOTO-PAINT.

Целью работы являлась разработка программного комплекса для автоматизации и уточнения соотношения площадей фаз при анализе морфологии поверхности гетерогенных ионообменных мембран. Объектами исследования были выпускаемые ОАО «Щекиноазот» (г. Щекино) гетерогенные катионообменные мембраны МК-40 и МК-41 и анионообменные мембраны МА-40 и МА-41.

Обнаружение активных участков поверхности (участков ионообменника) выполнялось посредством анализа гистограммы яркости методом пороговой обработки. Установлено, что для катионообменной мембраны МК-40 в набухшем состоянии доля ионообменной составляющей поверхности  $S = 0.234 \pm 0.008$ , а для мембраны МА-41И, характеризующейся наибольшим значением неэкранированной полиэтиленом поверхности среди исследуемых мембран, ее величина составляла  $0.30 \pm 0.01$ .

## Литература

- [1] Лопаткова Г.Ю., Володина Е.И., Письменская Н.Д, Никоненко В.В. Метод оценки проводящей поверхности гетерогенных мембран // Тезисы Всероссийской конференции «Мембранная электрохимия. Ионный перенос в органических и неорганических мембранах» 24-28 мая 2004г. Краснодар. 2004. С.29.

## ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ НАНОКОМПОЗИТОВ Au-In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

<sup>\*1</sup> *Оводок Е.А.*, <sup>2</sup> *Ивановская М.И.*, <sup>2</sup> *Котиков Д.А.*  
<sup>1</sup>БГУ, Минск, Беларусь, <sup>2</sup>НИИ ФХП БГУ, Минск, Беларусь  
*\*ovodokea@gmail.com*

Работа посвящена изучению особенностей структуры композитов Au-In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Ранее было установлено, что введение золота в In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> увеличивает чувствительность к СО и смещает её максимум в область меньших температур.

Исследуемые образцы In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Au-In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> получали золь-гель методом из золя In(OH)<sub>3</sub>. При получении Au-In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в золь In(OH)<sub>3</sub> вводили HAuCl<sub>4</sub>. Образцы прокаливали при 700°С. Структуру исследовали методами ЭМ, РФА, ДТА, оптической и ИК-спектроскопиями.

По данным ПЭМ, в образцах Au-In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (0,5 масс. % Au) размеры частиц золота 3 – 6 нм. Данные оптической спектроскопии подтверждают эти результаты. По данным оптической спектроскопии также можно предположить, что золото в образцах частично присутствует в виде кластеров Au<sub>*n*</sub> (*n* < 10). Частицы золота в образцах подвержены влиянию оксидной матрицы, так поглощение в области 305 – 320 нм в оптических спектрах Au-In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> может указывать на присутствие наряду с Au<sup>0</sup> "ионных форм" золота. Электронное взаимодействие между Au и In также подтверждается данными ИК-спектроскопии, наблюдается сдвиг частот колебаний в адсорбированных частицах.

По данным термического анализа в образцах, содержащих золото, замедляются процессы дегидратации при образовании композитов, и формирование кристаллической структуры оксида индия в Au-In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> происходит при более высокой температуре, чем в In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Таким образом, присутствие золота в образцах оказывает влияние на размер частиц In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: средний диаметр частиц оксида индия в образцах In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – 30 нм, а в Au-In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – 25 нм. Эти данные согласуются с ОКР, рассчитанными из рентгенограмм.

Золото, введенное в образцы, также оказывает влияние на состояние поверхности кристаллитов In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. По данным ИК-спектроскопии в образцах Au-In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> содержание воды и OH-групп возрастает относительно In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, при этом возрастает и интенсивность полос поглощения, соответствующих колебаниям связей в адсорбированных формах карбонатно-карбоксилатных структур. Это может свидетельствовать о развитой поверхности и ее высокой адсорбционной способности.

**НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ СОЗДАНИЯ  
НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ И  
НАНОМАТЕРИАЛОВ С ЗАДАНЫМИ  
СВОЙСТВАМИ И ФУНКЦИЯМИ**

# СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА СВИНЦОВО-ФТОРИДНОЙ НАНОСТЕКЛОКЕРАМИКИ, АКТИВИРОВАННОЙ ИОНАМИ ХРОМА

*\* Абдршин А.Н., Асеев В.А., Колобкова Е.В.,  
Никонов Н.В.*

*СПб ГУ ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*

*\*myltitabs@mail.ru*

Разработка и создание новых материалов, активированных ионами переходных металлов, является актуальной задачей. Одними из наиболее перспективных материалов являются наностеклокерамики, активированные ионами хрома. Ионы хрома обладают рядом достоинств: они обладают высокими сечениями поглощения и излучения (в разы больше чем ионы редкой земли), и широкими полосами люминесценции вплоть до сотен нм [1]. Целью данной работы являлось изучение спектрально-люминесцентных свойств свинцово-фторидных наноструктурированных стеклокерамических материалов, активированных ионами хрома.

Были разработаны и синтезированы свинцово-фторидные наностеклокерамики, активированные ионами хрома. Для выделения нанокристаллической фазы проводилась их вторичная термообработка при температурах 900°C и 1050°C в течение получаса.

Были проведены исследования спектрально-люминесцентных свойств стекол и стеклокерамик, активированных различными концентрациями хрома. По полученным данным был сделан вывод о вхождении хрома в кристаллическую фазу, о валентности хрома в данной фазе и определено влияние термообработки на спектры люминесценции.

## Литература

- [1] Ульяшенко А.М., Никонов Н.В., Пржеvusкий А.К. // Форстеритовая наностеклокерамика активированная  $Cr^{4+}$ , для волоконных лазеров и усилителей. Известия РАН. Серия физическая, том 71, № 2, Февраль 2007, С. 171-174

# СОРБЦИОННЫЕ, ТЕРМОЛИТИЧЕСКИЕ И МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОКСИГИДРАТОВ ЦИРКОНИЯ, ПОЛУЧЕННЫХ В ПРИСУТСТВИИ НЕИОННОГО ПАВ

*\* Аксёнова А.А., Авдин В.В.*

*НИУ ГОУ ВПО ЮУрГУ, Челябинск, Россия*

*\* anechka1408@mail.ru*

Гидролиз солей металлов в водной фазе жидких кристаллов коллоидных ПАВ, позволяющий получать нанодисперсные оксиды кремнезема, алюминия, титана и других неорганических веществ, исследуется рядом авторских коллективов [1], [2]. Однако, закономерности получения оксигидратных материалов в присутствии ПАВ в настоящий момент являются малоизученными.

Влияние ПАВ на термолитические и сорбционные характеристики исследовали на примере сорбции ионов с различными радиусами – ионов иттрия и кальция. Для снижения взаимодействия молекул ПАВ с золевыми частицами оксигидратов металла, использовали неионный широко распространённый смачиватель ОП-10. Содержание ПАВ в маточном растворе составляло (в массовых процентах): 0,00% (без ПАВ), 0,01% (молекулярные растворы ОП-10), 0,10% (сферические мицеллы), 1,00% (цилиндрические мицеллы). Сорбционные свойства полученных образцов исследовали по отношению к ионам металлов методом изомолярных серий. Термолиз оксигидратов изучали на синхронном термическом анализаторе Paulik-Paulik-Erdey 3434-C.

При определённых концентрациях ПАВ в маточном растворе, а так же определенных значениях pH формируются гели, которые после сушки и грануляции проявляют сорбционные свойства на порядок более высокие, чем сорбционные свойства образцов, полученных без ПАВ. При этом меняется и избирательность сорбции к определенным ионам, что позволяет применять ПАВ для направленного синтеза сорбентов с высокой сорбционной ёмкостью и селективностью.

## Литература

- [1] Dehong C., Zheng L., Ying W. et al // Journal of Materials Chemistry. – 2006. – Vol. 16. – P. 1511–1519.
- [2] Осипова В.В., Селиванова Н.М., Дановский Д.Е., Галяметдинов Ю.Г. // Вестник Казанского гос. тех. университета. – 2007. – №5. – С. 30–35.

# КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА, СИНТЕЗИРОВАННЫХ В ОБРАТНОМИЦЕЛЛЯРНЫХ РАСТВОРАХ, В ЗАВИСИМОСТИ ОТ РАЗМЕРА ЧАСТИЦ

<sup>\*2</sup> *Антонов А.Ю.,<sup>2</sup> Сергеев М.О.,<sup>2</sup> Нуртдинова К.Ф.,  
Ревина А.А.,<sup>2</sup> Боева О.А.*

<sup>1</sup> *ИФХЭ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва,  
Россия*

*\*zest-alant@mail.ru*

Интерес к наноматериалам обусловлен возможностью значительной модификации и даже принципиального изменения свойств известных материалов при переходе в нанокристаллическое состояние, новыми возможностями, которое открывает нанотехнология в создании материалов и изделий из структурных элементов нанометрового размера [1].

Ранее были разработаны методики синтеза наноструктурированных частиц металлов при химическом и радиационно-химическом восстановлении ионов металлов в обратномицеллярных растворах (ОМР) [2].

В работе изучены каталитические свойства композитных систем на основе наноструктурированных частиц серебра, синтезированных при радиационно-химическом и химическом восстановлении ионов серебра в обратномицеллярных растворах.

Показан факт изменения адсорбционных и каталитических свойств серебра при переходе от массивных образцов к наноструктурированным системам.

Рассмотрено влияние на каталитическую активность размеров образующихся в ОМР наночастиц серебра, выбранного метода восстановления (радиационно-химическое, химическое). Показана высокая чувствительность кинетики реакций гомомолекулярного дейтериеводородного обмена и орто-пара конверсии против к структуре наноконструктов на основе наночастиц серебра.

## Литература

- [1] А.И. Гусев. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. – 2-е изд., испр. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 416с..
- [2] Способ получения наноструктурных металлических частиц. Патент РФ 2147487.



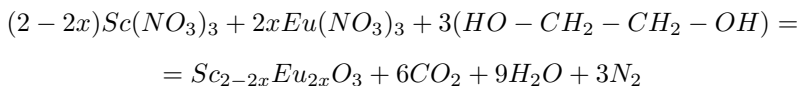
# СИНТЕЗ, МОРФОЛОГИЯ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОДИСПЕРСНОГО ОКСИДА $Sc_2O_3$ , ДОПИРОВАННОГО $Eu^{3+}$

\*<sup>1</sup>*Бакланова И.В.*, <sup>1</sup>*Красильников В.Н.*, <sup>1</sup>*Гырдасова О.И.*,  
<sup>1</sup>*Переляева Л.А.*, <sup>2</sup>*Кайгородова О.А.*

<sup>1</sup>*ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург, Россия*, <sup>2</sup>*ИЭФ УрО РАН,  
Екатеринбург, Россия*

\**baklanova\_i@ihim.uran.ru*

Материалы на основе оксида скандия, допированного РЗЭ, могут выступать в качестве матриц для различных оптических устройств. Цель настоящей работы состояла в разработке оригинальных методов синтеза нанодисперсных оксидов  $Sc_{2-2x}Eu_{2x}O_3$  с различной морфологией частиц, а также в изучении их спектральных характеристик. Синтез квазиодномерных оксидов  $Sc_{2-2x}Eu_{2x}O_3$  ( $x=0.01\div 0.1$ ) осуществляли путем термоллиза  $Sc_{1-x}Eu_x(CH_3COO)_3$ , кристаллы которого формируются в виде иголок с поперечным сечением порядка 0.5 мкм и длиной до 20–30 мкм. Превращение ацетата в оксид происходит псевдоморфно, то есть с передачей его частицам формы кристаллов прекурсора. Согласно данным рентгенофазового анализа все синтезированные образцы однофазны. С целью получения  $Sc_{1.95}Eu_{0.05}O_3$  в виде нанодисперсного порошка (размер частиц в пределах 50 нм) была использована оригинальная методика синтеза, основанная на реакции взаимодействия в редокс-системе, где окислитель - смесь нитратов Sc, Eu и восстановитель – этиленгликоль, который в отличие от глицина, мочевины и целлюлозы является жидкостью, способной растворять нитраты Sc и Eu при нагревании до 50–60°C с образованием прозрачного геля. Выше 80°C спонтанно протекает реакция:



В КР спектрах ( $\lambda=514.5$  нм  $Ar^+$ -лазер) оксидов  $Sc_{1.95}Eu_{0.05}O_3$ , синтезированных двумя методами, не наблюдается спектр комбинационного рассеяния  $Sc_2O_3$ . При данном возбуждении, которое является близким к возбуждению перехода  $\lambda_{эж}=525$  нм  $Eu^{3+}$  ( ${}^7F_0 \rightarrow {}^5D_1$ ), регистрируется очень активный эмиссионный спектр. Интенсивный узкий пик при  $3086$   $cm^{-1}$  (611 нм) и линия при  $3702$   $cm^{-1}$  (635 нм) вызваны сверхчувствительным переходом  ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_2$ . Менее интенсивные линии при  $2373$   $cm^{-1}$  (586 нм),  $2601$   $cm^{-1}$  (594 нм) и  $2805$   $cm^{-1}$  (601 нм) отвечают переходу  ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_1$ ; при  $2212$   $cm^{-1}$  (580 нм) и  $2283$   $cm^{-1}$  (582 нм) -  ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_0$ ; при  $4040$   $cm^{-1}$  (649 нм) -  ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_3$ ; при  $4924$   $cm^{-1}$  (689 нм) -  ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_4$ .

# ПОЛУЧЕНИЕ СВЕРХГИДРОФОБНОЙ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛИМЕРА ПРИ ПОМОЩИ МОДИФИКАЦИИ ИОННО-ТРЕКОВЫМ МЕТОДОМ

*Буланова М.А.*

*МУПО Ч Дубна, г. Дубна, Россия*

*ya-zaichonok@mail.ru*

Создание самоочищающихся сверхгидрофобных поверхностей является одним из перспективных направлений в современной нанохимии. Сверхгидрофобные материалы имеют поверхности, чрезвычайно не склонные к смачиванию (с углом контакта с водой, превышающим  $150^\circ$ ). Существует несколько способов создания таких поверхностей: литография (создание регулярных массивов острий), фрактальные методы, облучение тяжелыми ионами, облучение тяжелыми ионами с последующей химической обработкой и некоторые другие.

Целью нашей работы являлось получение анизотропных супергидрофобных поверхностей при помощи ионно-трековой обработки диэлектрических материалов. Используя в качестве исходной матрицы гидрофобный материал (поликарбонат, полипропилен) и создавая микрорельеф, мы попытались добиться несмачиваемости поверхности.

Работа включала несколько стадий:

1. Облучение материалов ионами на ускорителе под разными углами.
2. Химическая обработка и получение нано- и микроструктурированной развитой поверхности.
3. Измерение контактных углов смачивания.
4. Исследование полученных поверхностей при помощи РЭМ.
5. Нахождение зависимостей контактного угла смачивания от параметров получаемых поверхностей (плотность треков, глубина рельефа, угол наклона элементов рельефа, и т.д.)

При проведении экспериментов варьировались условия травления облученной ионами Кг (плотность треков  $10^8 \text{ см}^{-2}$ , энергия 250 МэВ) поликарбонатной плёнки толщиной 100 мкм.

Прослежены зависимости угла смачивания от параметров рельефа поверхности по мере его развития в процессе химического травления.

Исследована анизотропия смачиваемости в зависимости от наклона элементов микрорельефа на поверхности полимера.

# ОСОБЕННОСТИ ЗАПИСИ ФАЗОВЫХ ГОЛОГРАММ В ФОТОПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛАХ, СЕНСИБИЛИЗИРОВАННЫХ ОКСОНОЛЬНЫМИ КРАСИТЕЛЯМИ – ПРОИЗВОДНЫМИ БАРБИТУРОВЫХ КИСЛОТ

*\* Васильева Н.В., Шелковников В.В., Орлова Н.А.,  
Каргополова И.Ю., Ковалевский В.И.*

*НИОХ СО РАН, Новосибирск, Россия*

*\*nadya85@ngs.ru*

Поиск эффективных красителей для сенсбилизации реакции фотополимеризации является актуальным в связи с использованием этого процесса для записи голограмм в широком спектральном диапазоне видимой области спектра. В качестве новых красителей – сенсбилизаторов голографического фотополимерного материала (ГФПМ) нами был синтезирован ряд оксонольных красителей - производных барбитуровых кислот, поглощающих в видимой области спектра. Полученные красители оксонольного типа несут отрицательный заряд и используются в ГФПМ совместно с соинициатором, в качестве которого выступают соли органических катионов: сульфония, иодония, хинолиния. Целью работы являлось: выяснение эффективности записи голографических дифракционных решеток в ГФПМ на основе данных красителей-сенсбилизаторов в зависимости от структуры красителя, качественного и количественного состава композиции и условий записи. Запись голограмм проводили с использованием излучения как аргонового лазера (длина волны 514 нм), так и He-Ne – лазера (длина волны 633 нм).

Показана зависимость дифракционной эффективности (ДЭ) записи от интенсивности излучения Ar+ лазера и подобраны оптимальная мощность и экспозиция. Показана зависимость ДЭ пропускающих голограмм от природы и концентрации соинициатора. Исследована зависимость уровня ДЭ от периода решетки при записи пропускающих голограмм. Показано, что при увеличении периода решетки от 450 нм до 1850 нм происходит увеличение ДЭ голограммы от 0,5% до 23%. Измерены контуры угловой селективности пропускающих голограмм, в результате их аппроксимации по угловой зависимости амплитуды волны, дифрагированной на объемной пропускающей фазовой решетке, найдены величины модуляции показателя преломления и эффективные толщины ГФПМ.

# СТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НОВОГО НИЗКОМОДУЛЬНОГО СПЛАВА НА ОСНОВЕ ТИТАНА

<sup>\*1</sup> *Голосова О.А.*, <sup>1</sup> *Иванов М.Б.*, <sup>1</sup> *Колобов Ю.Р.*,

<sup>1</sup> *Маножин С.С.*, <sup>2</sup> *Зисман А.А.*

<sup>1</sup> *БелГУ, Белгород, Россия*, <sup>2</sup> *ФГУП ЦНИИ КМ Прометей,*

*Санкт-Петербург, Россия*

*\*golosova@bsu.edu.ru*

В последние десятилетия активно ведется разработка новых металлических биоматериалов, предназначенных для использования в качестве имплантатов для замены или восстановления поврежденных частей организма. Одновременно имеет место постоянное ужесточение требований, предъявляемых к таким материалам, а именно: к увеличению биохимической, биомеханической совместимости с тканями организма и улучшению функциональных характеристик. Принято считать, что лучшим материалом для изготовления имплантатов являются легкие и прочные сплавы на основе титана, благодаря их уникальной коррозионной стойкости и биосовместимости. В последнее время наибольший интерес представляют безникелевые  $\beta$ -сплавы титана с низким модулем упругости, близким к соответствующему для костной ткани, не содержащие вредных для живого организма легирующих элементов, получившие широкое распространение за рубежом. Авторами доклада был разработан титановый  $\beta$ -сплав на основе системы Ti-Nb-Mo-Zr. Исследуемый кованый слиток титанового  $\beta$ -сплава Ti-28Nb-8Mo-12Zr в исходном состоянии представлен полностью  $\beta$ -фазой со средним размером зерен 350 мкм. В результате механо-термической обработки в исследуемом сплаве формируется однородная глобулярная структуры со средним размером зерен 6 мкм. По данным просвечивающей электронной микроскопии зерна  $\beta$ -фазы имеют тонкую полосчатую субструктуру, ширина полос в которой варьируется от 20 до 500 нм. Возможным объяснением формирования такой структуры титана может быть фазовая неустойчивость материала ( $\beta$ -фазы) при закалке после рекристаллизационного отжига, приводящая к образованию тонких прослоек мартенситной фазы ( $\alpha''$ -мартенсит). В результате обработки предел прочности сплава Ti-28Nb-8Mo-12Zr увеличился до 800 МПа, что примерно на 22% больше по сравнению с исходным состоянием, а пластичность возросла почти в 8 раз и составляет 16%. К сожалению, наряду с увеличением прочности и пластичности после механо-термической обработки наблюдается также повышение значения модуля упругости с 64 ГПа (в исходном состоянии) до 73 ГПа.

## ПОЛИМОРФНЫЙ ПЕРЕХОД НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО АНАТАЗА ( $\text{TiO}_2$ ) В УДАРНЫХ ВОЛНАХ

*\*<sup>1</sup>Голышев А.А., <sup>2</sup>Конов Д.Ю., <sup>1</sup>Матюшенко Д.В.,*

*<sup>1</sup>Шульга Ю.М., <sup>1</sup>Молодец А.М.*

*<sup>1</sup>ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия, <sup>2</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия*

*\*golyshev@icp.ac.ru*

Исследования наноматериалов при высоких статических давлениях демонстрируют существенные отличия поведения наноматериалов от макроматериалов вдоль комнатной изотермы высокого давления. Исследования свойств и превращений наноматериалов вдоль высокотемпературных изотерм сдерживаются процессами спекания, которые укрупняют наночастицы и превращают наноматериал в обычный поликристалл. Ударноволновое сжатие твёрдых тел также позволяет целенаправленно изменять высокие температуры исследуемых материалов при высоких давлениях. В отличие от статических методов при ударном нагружении высокие давления и температуры возникают лишь на короткие (порядка микросекунд) времена. Эти времена оказываются достаточными для протекания полиморфных превращений, но слишком малыми для диффузионных процессов, к которым относится спекание. В этой связи исследованы образцы наноструктурированного анатаза после его ударноволнового ступенчатого сжатия до давлений 10-40 ГПа при различных начальных температурах. Показано, что, сохранённые после ударного сжатия образцы, представляют собой наноструктурированный колумбит.

# ВЛИЯНИЕ ФОСФОРНОЙ КИСЛОТЫ НА ПОРИСТУЮ СТРУКТУРУ СИЛИКАТНЫХ МАТЕРИАЛОВ<sup>1</sup>

*\* Епифанова А.А., Магаев О.В., Водянкина О.В.*

*ТГУ, Томск, Россия*

*\* epifanova@mail.ru*

Оксид фосфора является одной из основных добавок к высококочистым силикатным материалам, позволяющим модифицировать свойства и значительно расширять область применения таких композитов в оптике; в медицине, в качестве сенсоров, адсорбентов, катализаторов. В последние годы большое распространение получил золь-гель таких материалов. В этом случае получается однородный по составу, чистый образец, а также существует возможность контроля пористости и удельной поверхности при низкой температуре.

В данной работе объектами исследования стали силикатно-фосфатные материалы, полученные золь-гель методом при постоянном стехиометрическом соотношении реагентов и воды, при варьировании количества вводимой фосфорной кислоты от 5 до 50 мас. %. Целью работы являлось изучение влияния количества вводимой фосфорной кислоты на пористость, удельную поверхность и химический состав синтезированных силикатно-фосфатных материалов. Исследование процесса формирования структуры материала было проведено на стадии гелеобразования (измерение вязкости, рН, ЯМР-спектроскопические измерения <sup>31</sup>P и <sup>29</sup>Si), а также на стадии термообработки (ИК-спектроскопия, измерение удельной поверхности и пористости, ПЭМ).

Исследование, проведенное комплексом физико-химических методов, показало, что для образцов, с содержанием P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> более 5-10 мас. %, фосфорная кислота является порообразующим агентом. Таким образом, введение фосфорной кислоты влияет на начальном этапе синтеза на процессы формирования силикатно-фосфатного материала. Количество вводимой фосфорной кислоты определяет пористость, значение удельной поверхности, а также структуру и химический состав синтезированных силикатно-фосфатных материалов. Анализ данных, полученных в работе, позволяет выбрать оптимальные условия золь-гель синтеза силикатно-фосфатных систем.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке проекта ФЦП «Научные и научно – педагогические кадры инновационной России на 2009 – 2013 годы».

## НАНОПИГМЕНТЫ И ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПОЗИЦИИ НА ИХ ОСНОВЕ

*Заводчикова А.А.*

*ИХФ РАН, Москва, Россия*

*ivb@chph.ras.ru*

Разработаны экологически чистые методы получения нанопигментов путем нанесения красителей различных классов на природные, модифицированные природные или синтетические наноструктурированные частицы, обеспечивающие высокое, до 40 мас.ч., содержание окрашивающего компонента (красителя). Показано, что содержание красителя в нанопигменте при оптимальных условиях нанесения зависит, главным образом, от механизма сорбции, определяющегося, в свою очередь, химической природой наноструктурированных частиц и структурой красителя (наличия в нем определенных функциональных групп). Очень важную роль играет и структура наноструктурированных частиц, которая, в частном случае модифицированного катионными ПАВ монтмориллонита, зависит от структуры ПАВ. Обнаружены синергические эффекты повышения содержания красителя в нанопигменте при нанесении смесей красителей. Установлено, что нанопигменты на основе модифицированного монтмориллонита хорошо совмещаются с полимерами и олигомерами и могут быть использованы для получения окрашенных материалов. Цвет материала, как и цвет нанопигмента, определяется преимущественно цветом красителя, однако заметные колористические эффекты наблюдаются не только при варьировании содержания красителя, но и природы полимерной матрицы. Устойчивость нанопигментов к действию света коррелирует с собственной светостойкостью красителей и растет при увеличении содержания красителя в нанопигменте. Важным дополнительным фактором является природа полимерной матрицы, варьирование которой может в 2-8 раз увеличить светостойкость. Для пигментов на основе смесей красителей обнаружены синергические эффекты, приводящие к увеличению светостойкости, главным образом, за счет повышения устойчивости наименее светостойкого компонента. Нанопигменты действительно являются наноструктурированными частицами, что подтверждено данными о повышении термической стабильности полимерных композиций, полученными методом ТГА. Дополнительным аргументом является прозрачность окрашенных нанопигментами, в отличие от обычных пигментов, пленок вне области поглощения красителей.

# СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ОКСИДА ГРАФЕНА, ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО ОКТАДЕЦИЛАМИНОМ<sup>1</sup>

*\*<sup>2</sup>Каданцева Н.В., <sup>1</sup>Баскаков С.А., <sup>1</sup>Мурадян В.Е.*

*<sup>1</sup>ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия, <sup>2</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия*

*\*sabaskakov@gmail.com*

В настоящее время наблюдается интенсивный рост интереса к оксиду графита, соединению известному с середины 19 века. Этот интерес вызван открытием в 2004 году нового углеродного наноматериала – графена. Графен, как известно, состоит из  $sp_2$ -гибридизованных атомов углерода, соединенных в плоскую гексагональную кристаллическую решетку (толщина слоя графена 0,25 нм). В отличие от графена, атомы углерода в оксиде графена  $sp_3$ -гибридизованны, благодаря чему лист оксида графена становится «гофрированным» (толщина 1 слоя около 0,6 нм). Оксид графита содержит большое количество кислородсодержащих функциональных групп (-COOH, -O-, -OH), благодаря чему способен образовывать устойчивые коллоидные растворы в полярных растворителях, где он распадается на тонкие листки оксида графена (ОГ). Круг растворителей, в которых суспензия оксида графита устойчива длительное время ограничивается в основном высококипящими слаболетучими растворителями такими как вода, ДМФА, ДМСО, N-метилпироллидон, что в свою очередь ограничивает применение ОГ в различных приложениях. Однако стоит отметить, что наличие кислородсодержащих функциональных групп открывает широкие возможности для химического модифицирования ОГ и изменения его свойств, в т.ч. и растворимости.

Целью работы являлось введение в структуру ОГ длинноцепочечных алкильных групп ( $C_{18}H_{37}$ -), что позволяет получать суспензии ОГ, устойчивые в низкокипящих и легколетучих растворителях – ацетон, спирты, дихлорэтан и др. Синтез проводили в две стадии: 1) реакция карбоксильных групп ОГ с хлористым тиоилом с образованием соответствующих хлорангидридов, 2) амидирование хлорангидридных групп октадециламином в безводном толуоле. Полученные образцы были охарактеризованы широким набором физико-химических методов анализа: ИК-спектроскопия, масс-спектрометрия, ДСК-ТГА, СЭМ, элементный анализ.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке программы ОХНМ №7.



# ПОЛУЧЕНИЕ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ НИОБАТОВ ВИСМУТА <sup>1</sup>

*Каймиева О.С., \* Шатохина А.Н., Тарасова О.А.,  
Буянова Е.С., Жуковский В.М.  
УрГУ, Екатеринбург, Россия  
\*hn1986@mail.ru*

Сложнооксидные соединения с кислородно-ионной или смешанной проводимостью могут быть использованы в качестве твердых электролитов, материалов для сенсоров, кислородных мембран, катализаторов, катодов и анодов в твердооксидных топливных элементах. Висмутосодержащие оксидные соединения вызывают устойчивый интерес исследователей благодаря высоким значениям кислородной проводимости при низких температурах. Для получения стабильных проводящих модификаций применяют приемы многокомпонентного допирования исходных структур ванадатов, ниобатов, вольфраматов висмута.

В данной работе выполнено исследование областей устойчивого существования, структуры и проводящих характеристик твердых растворов на основе ниобатов висмута общего состава  $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{Nb}_{1-y}\text{W}_y\text{O}_4$ ,  $\text{Bi}_{7-x}\text{Y}_x\text{Nb}_{2-y}\text{Me}_y\text{O}_{15.5}$  и  $\text{Bi}_3\text{Nb}_{1-x}\text{Me}_x\text{O}_7$ , (где  $\text{Me} = \text{W}, \text{Zr}, \text{Fe}$  и  $\text{V}$ ). Твердые растворы получали по стандартной керамической технологии в интервале температур 500-850°С. С помощью РФА (ДРОН-3М,  $\text{CuK}\alpha$ -излучение) установлены границы областей гомогенности твердых растворов. Кристаллическая структура полученных твердых растворов описана в рамках кубической или тетрагональной ячейки. Выполнено уточнение параметров элементарных ячеек по однозначно проиндексированным линиям порошковых рентгенограмм. Проведена оценка размеров частиц порошков. Для спеченных брикетов выполнены термомеханические исследования (дилатометр DIL 402С). Методом РЭМ и проведено исследование морфологии и состава поверхности (растровый электронный микроскоп JOEL JSM-630LA).

Исследование электропроводности керамики проведено методом импедансной спектроскопии. Оценены параметры импеданса, подобраны эквивалентные схемы ячеек. Линейный вид политерм проводимости в интервале температур 800-300°С свидетельствует об отсутствии фазовых переходов в исследованной области. Выявлены наиболее перспективные по величине общей электропроводности и термической стабильности составы.

---

<sup>1</sup>НИР выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

# ИЗУЧЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ОБРАЗОВАНИЯ СТРУКТУРЫ В АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВАХ<sup>1</sup>

*\* Когтенкова О.А., Страумал Б.Б.*

*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*koololga@issp.ac.ru*

Сравнительно недавно было начато подробное исследование фазовых переходов на границах зерен. В результате этих исследований на традиционных объемных фазовых диаграммах появляются новые линии (коноды), описывающие свойства поликристалла с границами раздела. Такие зернограничные линии на фазовых диаграммах необходимо принимать во внимание – особенно при исследовании свойств материалов с нанокристаллическим размером зерен, поскольку объемная доля границ зерен и тройных стыков существенно возрастает в поликристаллах с зернами нанометровых размеров. Помимо зернограничных фазовых переходов смачивания, происходящих в двухфазной области S + L фазовых диаграмм, наблюдаются также зернограничные фазовые переходы в однофазной области.

В работах было показано, что в сплавах на основе алюминия под линией объемного солидуса наблюдается резкое увеличение пластичности материала (удлинение до разрушения может превысить 1000%). Это явление было названо высокоскоростной сверхпластичностью. Мы впервые предположили, что явление высокоскоростной сверхпластичности можно объяснить существованием равновесного зернограничного жидкоподобного слоя на границах зерен вблизи от линии объемного солидуса.

Исследования проводились на образцах с различным размером зерен. Согласно полученным данным по калориметрии и результатам структурных исследований границ зерен, была построена линия зернограничного солидуса на фазовой диаграмме для системы Al–Zn, которая проходит на 10–15 °C ниже линии объемного солидуса. В результате исследований помимо жидкофазного смачивания в системе Al–Zn наблюдалось твердофазное смачивание. Но если переход от неполного смачивания границ зерен к полному при жидкофазном смачивании происходит с повышением температуры, то при твердофазном смачивании этот переход происходит с понижением температуры.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ (МК-3748.2011.8)

# ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО–МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОСТРУКТУРНОЙ КЕРАМИКИ В УСЛОВИЯХ КВАЗИСТАТИЧЕСКОГО И ДИНАМИЧЕСКОГО НАГРУЖЕНИЯ<sup>1</sup>

*\*Коробенков М.В., Скрипняк В.В., Козулин А.А.,  
Кульков С.С.*

*ТГУ, Томск, Россия*

*\*kozulyn@ftf.tsu.ru*

В работе представлены результаты исследований влияния структурных факторов (поровой структуры, размеров зерна, фазового состава) на механические свойства опытных образцов наноструктурных керамических материалов на основе  $Al_2O_3$ , предназначенных для использования в защитных конструкциях. Исследование микроструктуры выполнено с использованием методов зондовой сканирующей микроскопии и оптической микроскопии. Для исследования фазового состава применялся метод совмещенного термогравиметрического анализа. Для исследования механического поведения наноструктурной керамики использован сервогидравлический универсальный высокоскоростной испытательный стенд Инстрон VHS 40/50–20 и твердомер Dugamín–500. Обнаружено, что размеры кристаллитов в исследованных образцах нанокерамики средний размер кристаллитов составляет 71 нм, а распределение пор близко к логнормальному. При одинаковой пористости 4,88 % образцы наноструктурной керамики с равномерным распределением пор в объеме обладают изгибной прочностью  $289 \pm 15$  МПа, а при наличии поровых кластеров –  $236 \pm 15$  МПа. Прочность на сжатие достигает  $1,52 \pm 0,05$  ГПа. Наибольший термодинамический эффект рекристаллизации обнаружен в нанокерамике, которые в исходном состоянии обладали наименьшей пористостью и размерами зерна матрицы 70 нм. Результаты исследования механических свойств наноструктурной оксид-алюминиевой керамики при квазистатических и динамических воздействиях свидетельствуют о слабом влиянии скорости деформации в диапазоне  $10^{-3}$  до  $1$  с<sup>-1</sup> на прочность при сжатии, изгибе, а также на вязкость разрушения. Показано, что в керамических материалах с пористостью менее 5% повышение прочностных характеристик достигается при субмикронных размерах зерна и пор.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке Минобрнауки ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 г. ГК П604 от 06.08.2009 г., ГК П1228 от 27.08.2009 г., АВЦП 2.1.2/13526.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. В.А. Скрипняк

## СПОСОБЫ ПОВЫШЕНИЯ БИОХИМИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ГИДРОКСИАПАТИТА И СОЗДАНИЕ КОМПОЗИТОВ НА ЕГО ОСНОВЕ

*\*<sup>1</sup>Лазебная М.А., <sup>1</sup>Колобов Ю.Р., <sup>2</sup>Астахов М.В.,  
<sup>1</sup>Храмов Г.В., <sup>1</sup>Гребцова Е.А.*

*<sup>1</sup>БелГУ, Белгород, Россия, <sup>2</sup>МИСИС, Москва, Россия*

*\*lazebnaya@bsu.edu.ru*

Создание материалов для медицинского протезирования является интенсивно развивающимся направлением современного материаловедения. В связи с тем, что кость представляет собой сложный органоминеральный композит, работы в данном направлении направлены на разработку синтетических материалов, наиболее приближенных химическому составу кости. Гидроксиапатит является наиболее популярным подобным материалом в настоящее время. Несмотря на то, синтез его ведется уже много лет, работы по усовершенствованию методики синтеза и созданию композитных материалов на его основе интенсивно ведутся и сейчас. Повышение его биохимической активности, а следовательно и сокращение сроков реабилитации пациентов в постоперационный период, возможно как за счет получения наноразмерных кристаллитов данного вещества, так и за счет кристаллохимического модифицирования гидроксиапатита биосовместимыми ионами, приводящее к увеличению дефектности структуры. В настоящей работе рассмотрен способ синтез гидроксиапатита на основе реакции нейтрализации, а в качестве варианта анионного замещения было рассмотрено оригинальный метод замещения силикат – ионами.

С использованием электролитов на основе гидроксиапатита и его модифицированных форм возможно получение композитов состава титан/биоактивное кальций-фосфатное покрытие. В качестве способа для формирования таких композитов использовался метод микродугового оксидирования. Полученные покрытия обладают низкой резорбируемостью и высокой биоактивностью за счет развитой системы пор. Исследование морфологии поверхности, химического и фазового состава, а также растворимости таких покрытий имеет важное значение для прогнозирования биорезорбции таких композитов в условиях *in vitro*. В работе представлены результаты исследования физико-химических свойств покрытий, полученных на наноструктурном титане методом микродугового оксидирования в электролитах различного состава.

# ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ МОНОФЕРРИТА РУБИДИЯ, ДОПИРОВАННОГО ДВУХЗАРЯДНЫМИ КАТИОНАМИ<sup>1</sup>

\* *Лажно Е.И., Шехтман Г.Ш., Бурмакин Е.И.,  
Плаксин С.В.*

*ИБТЭ УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

*\* volegova-ihthe@mail.ru*

Моноферрит рубидия  $\text{RbFeO}_2$  с каркасной структурой типа  $\beta$ -кристобалита обладает смешанной ионно-электронной проводимостью с преобладанием последней. Ранее было показано, что замещение в  $\text{RbMO}_2$  части ионов  $\text{M}^{3+}$  четырёх- или пятизарядными катионами приводит к снижению электронной составляющей и резкому росту рубидий-катионной проводимости, в результате образовавшиеся твёрдые растворы в определённом интервале температур (ниже  $\sim 600^\circ\text{C}$ ) и концентраций добавок являются практически чисто ионными проводниками с очень высокой рубидий-катионной проводимостью ( $\sim 10^{-2} \text{См}\cdot\text{см}^{-1}$  при  $200^\circ\text{C}$ ) [1].

В настоящей работе приведены результаты исследования электрических свойств твердых растворов на основе  $\text{RbFeO}_2$ , образующихся при замещении ионов рубидия двухзарядными катионами  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Sr}^{2+}$  или  $\text{Ba}^{2+}$ . Во всех исследованных системах  $\text{Rb}_{1-2x}\text{Me}_x\text{FeO}_2$  ( $\text{Me}=\text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$ ) введение  $\text{Me}^{2+}$  не сопровождается стабилизацией высокотемпературной формы  $\text{RbFeO}_2$ . В барийсодержащей системе замещение  $2\text{Rb}^+ \rightarrow \text{Ba}^{2+} + \text{V}_{\text{Rb}}$  приводит к возрастанию рубидий-катионной проводимости вследствие образования вакантных позиций в подрешётке рубидия и к снижению электронной составляющей, которое, однако, менее существенно, чем при замещении  $\text{Fe}^{3+}$  катионами большего заряда. В результате практически чисто рубидий-катионная проводимость в системе с барием наблюдается ниже  $\sim 350^\circ\text{C}$  ( $2 \cdot 10^{-2} \text{См}\cdot\text{см}^{-1}$  при  $300^\circ\text{C}$ ). В системах  $\text{Rb}_{1-2x}\text{Me}_x\text{FeO}_2$  ( $\text{Me}=\text{Ca}, \text{Sr}$ ) снижение электронной проводимости при замещении рубидия двухзарядными катионами ещё менее существенно, и во всей исследованной области составов ( $x \leq 0,1$  в системе со стронцием,  $x \leq 0,15$  в системе с кальцием) и температур ( $300\text{--}750^\circ\text{C}$ ) проводимость носит смешанный ионно-электронный характер.

## Литература

- [1] Бурмакин Е.И., Волегова Е.И., Шехтман Г.Ш. // Электрохимия. 2010. Т.46. С.1413.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена в рамках Научного конкурсного проекта молодых ученых и аспирантов УрО РАН, грант № 10-32-НП-100.

**СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ  
ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ  
ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКИХ МЕТАЛЛО-СУЛЬФИДОВ С  
ЛИТИЕМ В ИССЛЕДОВАНИЯХ ПО МЕТОДАМ  
ИМПУЛЬСНОГО ПОТЕНЦИОСТАТИЧЕСКОГО  
ТИТРОВАНИЯ, ЦИКЛИЧЕСКОЙ  
ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИИ И СЕТЕВОЙ  
ТЕРМОДИНАМИКИ**

*<sup>1</sup>Маркевич А.В., <sup>\*1</sup>Апостолова Р.Д., <sup>2</sup>Шембель Е.М.  
<sup>1</sup>УГХТУ, Днепрпетровск, Украина, <sup>2</sup>УГХТУ, Днепрпетровск,  
Украина; Enerize Corp., Coral Springs, USA  
\*shembel@onil.dp.ua*

Важнейшие технические характеристики литиевых ХИТ определяются в основном структурными и кинетическими преобразованиями в твердой фазе и процессами на поверхности раздела твердая фаза/электролит. Определяемые кинетические параметры электродного процесса зачастую зависят от используемого метода, для каждого из которых характерны определенные допущения. Поэтому проведено исследование кинетических аспектов синтезированных авторами электролитических сульфидов железа и никеля в макетах литиевых аккумуляторов с помощью различных экспериментальных методов. Сделана сравнительная оценка коэффициента химической диффузии ионов лития (DLi) в твердой фазе, а также проанализировано омическое падение потенциала в зависимости от степени литирования указанных сульфидов. Обнаружено соответствие между максимумами кривых дифференциальной интеркаляционной емкости электролитических железно - и никель - сульфидных электродов и минимумами соответствующих зависимостей коэффициента химической диффузии ионов лития от потенциала электрода. На стадии восстановления вблизи 1.5 В в электролитическом сульфиде железа при взаимодействии с литием возможен фазовый переход при наличии сил отталкивания между заряженными частицами.

Сравнение реальных вольтамперограмм с рассчитанными теоретически модельными вольтамперограммами, основанными на представлениях изотермы Фрумкина, позволило оценить также такие кинетические параметры как константу скорости переноса ионов лития (Ks), параметр взаимодействия ионов лития с интеркаляционными местами (g) и энергию взаимодействия заряженных частиц в электролитическом сульфиде железа.

## СИНТЕЗ И ЭПР ИССЛЕДОВАНИЕ $Zn_{1-x}Cu_xO$ ( $0 \leq x \leq 0.1$ )

\* *Мелкозерова М.А., Гырдасова О.И., Заболоцкая Е.В.,  
Красильников В.Н.*

*ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

\* *melkozerova@yandex.ru*

Оксид цинка допированный катионами 3d-металлов представляет интерес в качестве перспективного фотокаталитического материала. Свойства катализаторов во многом определяются дефектной структурой и морфологией поверхности. В данной работе приведены результаты ЭПР исследования образцов  $Zn_{1-x}Cu_xO$  ( $0 \leq x \leq 0.1$ ), синтезированных различными методами. Образцы получены термоллизом  $Zn_{1-x}Cu_x(HCOO)(OCH_2CH_2O)_{1/2}$  (I) и  $Zn_{1-x}Cu_x(HCOO)_2$  (II). Препараты синтезированы в сольвотермальных условиях: (I) – из среды этиленгликоля, (II) – из водной среды. Кроме того, твердофазно были получены образцы  $Zn_{1-x}Cu_xO$  ( $0 \leq x \leq 0.01$ ) (III). Методом РЭМ показано, что при температуре  $500^\circ C$  продукты термоллиза прекурсоров (II) представляют из себя нанодисперсные неструктурированные порошки с размером зерна около 30 нм. Волокнистые комплексы (I) при этой температуре псевдоморфно превращаются в трубчатые квазиодномеры. Спектры ЭПР медьсодержащих образцов, полученных способом (I), представляют собой суперпозицию широкого несимметричного сигнала, предположительно связанного с магнитным упорядочением, и узкой линии ( $\Delta H = 3.2$  Гс) с g-фактором 2.00. Интенсивность указанной линии возрастает без изменения ширины с увеличением содержания меди и повышением температуры отжига от  $300^\circ C$  до  $500^\circ C$ . На спектрах образцов, синтезированных по методике (II), дополнительно присутствует сигнал с g-фактором 1.96 ( $\Delta H = 6$  Гс). Интересным представляется тот факт, что данные сигналы обнаружены также в недопированном  $ZnO$ , полученном из прекурсора (I). Это позволяет утверждать, что их возникновение не связано с ионами  $Cu^{2+}$ . Согласно литературным данным, ЭПР сигналы с g-факторами 1.96 и 2.00 в  $ZnO$  могут быть обусловлены F-центрами, сорбированной поверхностью кислородными радикалами или мелкими донорными уровнями примесей. Однако, данные относительно происхождения каждой из линий достаточно противоречивы. В отличие от образцов, синтезированных с использованием прекурсоров, на спектрах образцов, полученных твердофазно (III), указанных линий не обнаружено. Отнесение узких сигналов к тому или иному виду дефектов требует дополнительных исследований. На настоящем этапе можно говорить о влиянии условий получения и степени допирования на дефектность  $ZnO$ .

# СТАДИИ ФОРМИРОВАНИЯ МИКРОКРИСТАЛЛА ОКСИДНОЙ ВОЛЬФРАМОВОЙ БРОНЗЫ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ ЭЛЕКТРОЛИЗЕ РАСПЛАВА

*\* Меляева А.А., Вакарин С.В., Семерикова О.Л.,  
Плаксин С.В., Панкратов А.А., Зайков Ю.П.  
ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург, Россия  
\*a.melyaeva@ihte.uran.ru*

Ранее при изучении электроосаждения оксидных вольфрамовых бронз  $K_xLi_yWO_3$  гексагональной структуры было установлено, что электрохимический способ позволяет получить нанокристаллические осадки на вольфрамовой подложке. При этом было показано, что процесс образования наносистемы на электроде проходит разные стадии. В работе [1] были указаны две начальные стадии формирования микрокристалла: слабо взаимодействующие кластеры (в расплаве) до начала их срастания и сильно взаимодействующие кластеры после начала их срастания. В дальнейшем изменение межкластерного взаимодействия характеризуется межфазными напряжениями, которые генерируют образование промежуточной шейки за счёт поверхностного натяжения

Первоначально нанокластеры не имеют огранки. Огранка появлялась в дальнейшем при заполнении пространства между иглами. В данной работе нами показано, что процесс заполнения идет за счёт послойного роста вдоль шейки. Первоначально слои имеют форму окружности, центр которой совпадает с осью иглы. В процессе роста наблюдается изменение формы распространяющихся слоев. При этом слои принимают форму шестиугольника, стороны которого параллельны ребрам формирующегося гексагонального кристалла. В дальнейшем базисная плоскость (0001) становится гладкой. Процесс формирования правильного микрокристалла составляет несколько секунд.

## Литература

- [1] Вакарин С.В., Меляева А.А., Панкратов А.А., Плаксин С.В., Зайков Ю.П. Формирование микрокристалла оксидной вольфрамовой бронзы при электрохимическом синтезе из расплавленных солей // Кинетика и механизм кристаллизации, самоорганизация при фазообразовании: Тез. докл. VI Междунар. Науч. Конф. Иваново: 2010. С. 48



## СИНТЕЗ НАНОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ В ГАЛОГЕНИДНЫХ РАСПЛАВАХ, ИХ ВЫДЕЛЕНИЕ И ДИАГНОСТИКА

*\* Моденов Д.В., Докучович В.Н., Хохлов В.А.*

*ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

*\*Modenov@ihte.uran.ru*

В последние годы большое внимание уделяется электрохимическим и каталитическим системам, в которых используются наночастицы и тонкопленочные покрытия на их основе. Синтез таких частиц сопряжен с рядом трудностей, и традиционными методами достичь значительного прогресса в этом направлении не удается. Поэтому разработка способов получения наноразмерных функциональных материалов остается актуальной задачей.

В данной работе испытан новый метод синтеза кобальтата лития в расплавленных смесях хлоридов лития и кобальта (II) под действием кислородсодержащих газовых сред. Расплавленные смеси  $\text{LiCl}$  и  $\text{CoCl}_2$  различного состава обрабатывали сухим воздухом при температурах 600–700°C в течение 6–8 часов, барботируя его через расплав либо пропуская над поверхностью расплава.

После охлаждения смеси до комнатной температуры солевой плав растворяли в дистиллированной воде. Полученную взвесь фильтровали через два слоя фильтра «синяя лента». Идентификацию промытого и высушенного порошка проводили методом ИК спектроскопии. Результаты анализа показали, что данный порошок представляет собой  $\text{LiCoO}_2$  с малыми примесями оксидов кобальта.

Поскольку при фильтровании значительная часть взвешенных в растворе частиц проходила через фильтр, то для их выделения был использован электрофоретический метод. Электрофорез проводили при комнатной температуре в электрохимической ячейке с двумя пластинчатыми металлическими электродами, между которыми находился фильтр. При пропускании через ячейку постоянного тока наблюдалось перемещение взвешенных частиц к катоду и их осаждение на его поверхности. По истечении 6–8 часов пластину с осадком вынимали из раствора, промывали дистиллированной водой и сушили.

Исследование химического состава полученной тонкой пленки проводили методами фотоэлектронной и КРС спектроскопии. На основании результатов анализа заключили, что осажденные частицы, как и отфильтрованный порошок, представляют собой  $\text{LiCoO}_2$ .

Размеры и форму осажденных частиц определяли методом сканирующей электронной микроскопии. В зависимости от условий синтеза размер частиц варьировался от 20 до 200 нм.

# ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМЫ И СТРУКТУРЫ БИНАРНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ ЗОЛОТО-МЕДЬ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ КОНЦЕНТРАЦИЯХ КОМПОНЕНТ

*Мясниченко В.С., \* Старостенков М.Д.*

*АлтГТУ, Барнаул, Россия*

*\*genphys@mail.ru*

Методом молекулярной динамики с использованием многочастичного потенциала межатомного взаимодействия [1] изучена структура двухкомпонентных нанокластеров вида  $\text{Cu}_n\text{Au}_{144-n}$  различного состава. Получена доля и распределение атомов с упаковками, соответствующими фазам ГЦК, ГПУ и Франка-Каспера.

Начальная конфигурация кластера задавалась в виде блока ГЦК кристалла в случае чистых металлов либо в виде элемента одного из типов сверхструктур, в зависимости от задаваемой концентрации компонент. Затем в течение 5 пс проводился разогрев модельной системы до температуры 1000 К. На следующем этапе выполнялось охлаждение системы с шагом  $\Delta T$  равным 1.0К каждые 1 пс.

Таблица 1. Сравнение состава ядра и энергии наносистем  $\text{Cu}_n\text{Au}_{144-n}$

Кластер	Энергия, Эв/атом	ГЦК фаза	ГПУ фаза	Фаза Ф-К 12 атомов	Прочие атомы ядра
$\text{Cu}_{144}$	-3.1550	6	23	23	0
$\text{Cu}_{108}\text{Au}_{36}$	-3.2964	0	28	22	0
$\text{Cu}_{72}\text{Au}_{72}$	-3.4219	0	29	20	0
$\text{Cu}_{36}\text{Au}_{108}$	-3.5204	0	2	16	6
$\text{Au}_{144}$	-3.5769	4	21	13	5

Известно, что макроскопическая система Cu-Au образует неограниченные твердые растворы. При концентрациях компонент 75% на 25% и 25% на 75% образуются упорядоченные сверхструктуры  $L1_2$  на основе ГЦК решетки [2]. Как можно видеть из таблицы, бинарные системы Cu-Au рассмотренного размера упорядочиваются без образования кристаллической ГЦК фазы.

## Литература

- [1] Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Phys. Rev. B. 1993, V.№ 48. P.22-33.
- [2] Мясниченко В.С. Исследование энергетических и структурных характеристик упорядочивающихся сплавов системы Cu-Au // Перспективные материалы. - 2009, №7. - С. 228-234.

# ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ ПЛАЗМОННОГО РЕЗОНАНСА НА ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ ИОНОВ ЭРБИЯ И ЕВРОПИЯ

*\*Некрасова Я.А., Асеев В.А., Игнатъев А.И.,  
Никоноров Н.В.*

*СПбГУ ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*

*\*Nekrasova@oi.ifmo.ru*

На сегодняшний день большое внимание уделяется разработке новых люминофоров на основе неорганических материалов, активированных ионами редкой земли. Перспективным направлением развития люминофоров является усиление их люминесценции при плазмонном резонансе. В работах [1, 2] показано усиление люминесценции эрбия и церия при одновременном выделении серебряного плазмона в объеме стекла. Усиление люминесценции синей области спектра может достигать 100 раз [1]. Целью данной работы являлось изучение влияния серебряного плазмона на интенсивности люминесценции ионов европия и эрбия.

Были разработаны и синтезированы алюмо-натриево-силикатные стекла, содержащие в своем составе ионы серебра и активированные редкоземельными ионами европия (0,1 мол%) и эрбия (0,5 мол%). Для выделения плазмона образцы подвергались облучению УФ лампой, с различными дозами. Затем проводилась их вторичная термообработка при температуре 560°С в течение 3 часов.

Были исследованы изменения интенсивностей люминесценции полученных стекол в видимой области спектра. Показано влияние плазмонного резонанса на люминесцентные свойства ионов эрбия и европия.

## Литература

- [1] Heng-yong Weia, Jian Lina, Zhao-bin Fenga, Dong-wei Li, Yan Maa, Wen-hai Huang. // Enhancement of up-conversion luminescence from  $Er^{3+}-Yb^{3+}$ -codoped tellurite films by Ag nanoparticles embedded in glass substrates. Materials Science and Engineering, 2010. В. 172. P. 321–326.
- [2] Wen-Hsuan Chao, Ren-Jye Wu, Chih-Song Tsai, Tai-Bor Wu. // Surface plasmon-enhanced emission from Ag-coated Ce doped  $Y_3Al_5O_{12}$  thin films phosphor capped with a dielectric layer of  $SiO_2$ . Journal of Applied physics. 2010. P. 107.

## ТВЕРДЫЕ КАЛИЙПРОВОДЯЩИЕ ЭЛЕКТРОЛИТЫ В СМЕШАННЫХ АЛЮМОФЕРРИТНЫХ СИСТЕМАХ

\* *Нечаев Г.В., Бурмакин Е.И., Шехтман Г.Ш.*

*ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

\**g.nechaev@ihte.uran.ru*

Твердые растворы на основе соединений  $\text{KMO}_2$  ( $M = \text{Al, Fe, Ga}$ ) являются одними из лучших поликристаллических калий-катионных проводников, известных в настоящее время. Наиболее высокую проводимость из них имеют электролиты на основе  $\text{KFeO}_2$ , однако они наименее устойчивы в восстановительных средах. С целью оптимизации свойств электролитов и исследования закономерностей ионного переноса в сложных многокомпонентных системах нами синтезированы и исследованы новые калий-алюмоферритные твердые электролиты составов  $\text{K}_{1.80}(\text{Fe}_{1-x}\text{Al}_x)_{1.90}\text{V}_{0.10}\text{O}_4$  (I) и  $\text{K}_{1.85}(\text{Fe}_{1-x}\text{Al}_x)_{1.925}\text{P}_{0.075}\text{O}_4$  (II), где  $0 \leq x \leq 1$ . Моноферрит и моноалюминат калия существуют в двух полиморфных модификациях, температуры  $\beta - \gamma$  перехода составляют соответственно 700 и 540°C.  $\gamma$ -фазы характеризуются разупорядочением калиевой подрешетки.

По данным РФА, при обычных температурах все электролиты имели структуру  $\beta\text{-KFeO}_2$  ( $\text{KAlO}_2$ ). Однако концентрационные зависимости проводимости ведут себя по-разному. В системе I при 600-700°C проводимость несколько снижается в области  $x = 0,2$ , а далее в широком интервале составов ( $x = 0,2 - 0,6$ ) при всех исследованных температурах (300-700°C) меняется очень слабо. Такое поведение обусловлено снижением температур  $\beta - \gamma$  перехода с ростом  $x$ , что компенсирует отрицательное влияние снижения концентрации железа. Таким образом, на примере системы I показана возможность увеличения стабильности калий-ферритных электролитов за счет введения ионов алюминия при незначительном снижении проводимости. Последняя в области составов  $x = 0,2 - 0,6$  превышает  $10^{-2} \text{ См} \cdot \text{см}^{-1}$  при 400°C и близка к  $10^{-1} \text{ См} \cdot \text{см}^{-1}$  при 700°C. Эти значения следует считать весьма высокими для столь крупного катиона, как  $\text{K}^+$ . Совершенно иное поведение показывает система II. Здесь при всех исследованных температурах обнаружено не встречавшееся ранее явление существования минимума на изотермах проводимости. Такое явление представляет большой научный интерес и предположительно может быть объяснено образованием дефектных кластеров, в которых подвижность ионов калия ниже, чем в составах с одним трехзарядным катионом.

# ВЛИЯНИЕ СПОСОБА ВОССТАНОВЛЕНИЯ НА СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА ОБРАЗУЮЩИХСЯ В ОБРАТНОМИЦЕЛЛЯРНОМ РАСТВОРЕ

*\*<sup>2</sup> Нуртдинова К.Ф., <sup>2</sup> Сергеев М.О., <sup>2</sup> Антонов А.Ю.,  
<sup>1</sup> Ревина А.А., <sup>2</sup> Боева О.А.*

*<sup>1</sup> ИФХЭ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup> РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва,  
Россия*

*\* karish@list.ru*

В последние годы интерес к изучению наноразмерных частиц существенно возрос. Это связано не только с уникальными свойствами наночастиц, но и с тем, что открылись новые перспективные возможности синтеза наноструктурных частиц металлов при создании композитных наноматериалов с заданными свойствами.

От способа получения и условий синтеза наночастиц зависят многие параметры и свойства получаемых наноразмерных частиц, такие как размер, форма, стабильность частиц во времени, возможность нанесения их на различные носители, физико-химические свойства, в том числе адсорбционные и каталитические свойства. Поэтому большое внимание уделяется выбору метода синтеза наночастиц металлов [1].

Целью работы являлось изучение оптических и каталитических свойств наночастиц серебра, полученных радиационно-химическим и химическим методами восстановления ионов серебра в обратномцеллярных растворах.

Рассмотрено влияние способа синтеза Ag на их каталитическую активность. Выявлены различия в адсорбционных свойствах наночастиц.

## Литература

- [1] Thomas S., Schafer R., Caro J., Seidel-Morgenstern A. // Catalysis Today. 2001. V. 67. P. 205.

# ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРМОУДАРНЫХ НАГРУЖЕНИЙ НА СТРУКТУРУ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ $ZrO_2$

*Проматов В.В.*

*ИФПМ СО РАН, Томск, Россия*

*vvpromakhov@mail.ru*

Высокая температура плавления диоксида циркония и стабильность химического состава в окислительной атмосфере предполагают возможность его использования в условиях повышенных температур. Целью данной работы является изучение структурно-фазовых превращений в нанокристаллической керамике на основе частично стабилизированного  $ZrO_2$  в процессе термоударных нагрузжений.

Исследовались образцы в форме дисков, полученные формированием нанокристаллических порошков  $ZrO_2$ , допированных различным количеством (3, 5, 10, 15, 20 вес.%) оксида магния, и вследствие этого, соотношением долей высокотемпературных и низкотемпературной модификаций  $ZrO_2$ .

Проведено изучение влияние термоциклирования при охлаждении в воду от температуры  $1000^\circ C$  на структурные и фазовые превращения в циркониевой керамике с разным соотношением долей низко- и высокотемпературных фаз. Исследования поверхности образцов после каждого из термоиспытаний показали, что при первом термонагружении происходит ее микрорастрескивание с образованием фрагментов, количество и размер которых при последующих испытаниях сохранялись без заметных изменений.

Согласно данным рентгенофазового анализа по мере увеличения числа термоиспытаний в образцах всех составов сокращалось количество кубической и тетрагональной модификаций  $ZrO_2$  и, соответственно, возрастало количество моноклинной модификации. Несмотря на практически полное исчезновение высокотемпературных модификаций  $ZrO_2$  в нагружаемых образцах, они не имели сколов и не разрушались при дальнейших термонагружениях.

Показано, что независимо от соотношения высокотемпературных и низкотемпературной модификации  $ZrO_2$  в керамике происходит распад твёрдого раствора  $ZrO_2$ - $MgO$ , однако даже при практически полном выходе  $MgO$ , т.е. расстабилизации, керамика сохраняет способность противостоять термонагружениям.

# МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОКСИГИДРАТОВ ИТТРИЯ, ПОЛУЧЕННЫХ ТЕМПЛАТНЫМ МЕТОДОМ СИНТЕЗА

*\*Сафонова Т.В., Авдин В.В.*

*НИУ ГОУ ВПО ЮУрГУ, Челябинск, Россия*

*\*sova87.87@mail.ru*

Одним из подходов, позволяющих прецизионно контролировать форму и размеры пор в оксидных материалах в ходе синтеза, является темплатный метод, который заключается в гидролизе и поликонденсации соединений, содержащих целевые атомы, в присутствии мицелл поверхностно-активных веществ (ПАВ) в водных или водно-спиртовых средах. Данный метод синтеза позволяет получать материалы, диаметр пор которых можно варьировать от 2 до 20 нм [1], [2]. Однако закономерности получения оксигидратных гелей в присутствии ПАВ в настоящее время изучены не достаточно. В работе исследовано влияние неионогенного смачивателя марки ОП -10 на физико-химические и структурные свойства ксерогеля оксигидрата иттрия.

Неионный тип ПАВ выбрали для исключения возможности образования соли ПАВ с ионами маточного раствора. Содержание ПАВ в маточном растворе составило: 0,00%, 0,01% (область существования молекулярных растворов), 0,10% (область образования сферических мицелл) и 1,00% (область образования червеобразных мицелл). Гели получали при pH 9,0, 9,3 и 9,5 быстрым аммиачным гидролизом. Для полученных образцов определяли сорбционные, термолитические свойства, и морфологию их поверхности.

Анализ экспериментальных результатов показывает, что при формировании оксигидратов иттрия золевые частицы адсорбируются на поверхности червеобразных мицелл ПАВ. Последующая коагуляция приводит к образованию палочкообразных наноразмерных частиц, формирующих пористую структуру оксигидрата с высокой сорбционной активностью.

## Литература

- [1] TM. Signoretto, A. Breda, F. Sooma, F. Pinna / Mesoporous sulphated zirconia by liquid-crystal // Microporous and Materials. – V.91, - 2006. – P. 23–32.
- [2] Debra J. McIntosh, Rondd A. Kydd / Tailoring the pore size of mesoporous sulfated zirconia // Microporous and Materials. – V.37, - 2000. – P. 281–289.

## ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ ПЛАТИНЫ

<sup>\*2</sup> *Сергеев М.О.,* <sup>2</sup> *Антонов А.Ю.,* <sup>2</sup> *Жаворонкова К.Н.,*

<sup>1</sup> *Ревина А.А.,* <sup>2</sup> *Боева О.А.*

<sup>1</sup> *ИФХЭ РАН, Москва, Россия,* <sup>2</sup> *РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

*\*Mihail-Ol-Sergeev@yandex.ru*

Размер частиц является ключевым фактором, определяющим свойства катализаторов, активный компонент которых распределён на носителе в виде частиц нанометрового диапазона. Размерный эффект широко распространён в гетерогенном катализе. Во многих случаях наночастицы проявляют каталитическую активность там, где более крупные частицы не активны [1].

В каталитических процессах, связанных с активацией молекулярного водорода, наиболее активными катализаторами являются катализаторы на основе металлов платиновой группы. Изучение каталитической реакции гомомолекулярного изотопного обмена водорода позволяет предвидеть активности катализаторов в отношении многочисленных реакций, идущих с участием водорода.

Целью работы являлось изучение влияния размеров и методов получения наночастиц платины на каталитическую активность композитных систем на их основе.

Наночастицы платины синтезированы в обратноицеллярных растворах, представляющих собой трёхкомпонентную систему водный раствор соли/АОТ/изооктан. Синтез проводился в процессе радиационно-химического восстановления ионов платины, при воздействии на обратноицеллярный раствор  $\gamma$ -излучения  $^{60}\text{Co}$ . На основе полученных наночастиц приготовлены композитные системы:  $\text{Pt}^{\text{RadCh}}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ , после чего изучены каталитические свойства данных систем в отношении реакций изотопного дейтеро-водородного обмена.

В работе найдена зависимость размера наночастиц от значений коэффициента сольубилизации. Установлена зависимость между размерами наночастиц платины и каталитической активностью композитных систем на их основе.

### Литература

- [1] Г.Б. Сергеев, Нанохимия, 2-е изд., исправ. и доп. - М.: Изд-во МГУ, 2007, 336 с.



## СТРУКТУРНЫЕ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ГИДРООКИСЛАХ АЛЮМИНИЯ

*Скрипняк В.В.*

*ТГУ, Томск, Россия*

*skrp@ftf.tsu.ru*

Пористые керамики – это особый класс материалов, эксплуатационные свойства которых определяются характеристиками пористой структуры. Известно много технологических подходов, обеспечивающих необходимый объём порового пространства в материалах, однако наиболее предпочтительным с точки зрения регулирования геометрии пор является метод, основанный на использовании органических порообразующих добавок. Альтернативой использованию органических порообразователей в технологии получения пористых керамик может служить использование гидрозолей. Необходимая пористость в этом случае обеспечивается разложением гидрозоля до оксида. Геометрия пор в случае использования при получении пористых материалов гидроокислов будет определяться фазовым составом используемого гидроокисла и морфологией его частиц. Температура фазовых переходов, в свою очередь, зависит от метода получения порошка гидроокисла.

В данной работе представлены результаты изучения структурных и фазовых переходов в системе гидрооксид алюминия – оксид алюминия. Исследовались порошки гидроокиси алюминия, полученные: гидролизом нанопорошка алюминия при температуре 50 °С с последующей сушкой при температуре 60 °С и 120 °С, и разложением алюминатного раствора (ГА-3). На рентгеновской дифрактограмме порошка гидроокиси алюминия, полученного гидролизом алюминия при 60 °С, присутствовали рефлексы двух кристаллических форм гидрооксида алюминия – байерита  $\text{Al}(\text{OH})_3$  и бёмита  $\text{AlOOH}$ , и очень слабые рефлексы тетрагональной модификации  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Рефлексы кристаллических форм гидрооксида алюминия значительно отличались по своей ширине. Средний размер областей когерентного рассеяния (ОКР), определённый по уширению рефлекса типа (020) бёмита, составил 5 нм, а ОКР байерита, определённый по уширению рефлекса типа (201), 24 нм. При электронно микроскопическом анализе порошка гидроокиси алюминия, полученного гидролизом алюминия при 60 °С, наблюдались частицы трёх морфологических видов: отдельные частицы и два вида агрегатов, отличающихся по строению. Агрегаты первого вида – «первичные» агрегаты, состояли из отдельных частиц, агрегаты второго вида – «вторичные» агрегаты, состояли из «первичных» агрегатов. Отмечен структурный переход модификации бемит  $\text{Al}(\text{OH})_3$  в структурную модификацию байерит  $\text{Al}(\text{OOH})$ .

# ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ НА МЕХАНИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ СПЛАВОВ ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ<sup>1</sup>

*Скрипняк Н.В.*  
*ТГУ, Томск, Россия*  
*skrp@ftf.tsu.ru*

Образование наноструктурированных покрытий на поверхности изделий из легких сплавов позволяет существенно повысить их прочностные показатели, коррозионную стойкость, снизить коэффициент трения на структурированной поверхности. Среди методов формирования таких покрытий особый интерес представляют методы поверхностной пластической деформации (ППД), с помощью которых достигаются структурно-фазовые изменения материала в приповерхностной зоне толщиной от 50 до 100 мкм. Поверхностные слои с нано- и субмикронными размерами зерна являются основной причиной существенной повышения прочности и функциональных свойств изделий. В данной работе представлены результаты компьютерного моделирования высокоскоростной деформации образцов сплавов с поверхностным наноструктурированным слоем, выполненного с применением модели в рамках подхода вычислительной механики материалов. Используемая физико-математическая модель позволяет выполнять в трехмерной постановке численные исследования процессов деформации и развития повреждений на мезоскопическом уровне в легких ГЦК и ГПУ сплавах с поверхностным наноструктурированным слоем. Рассмотрены характерные структуры поверхностных слоев, которые формируются в легких сплавах методами ППД. В нанокристаллическом (НК) слое кристаллиты имеют размеры порядка нескольких десятков нанометров. В субмикрокристаллическом слое (СМК) размеры зерна варьируются от 100 нм до 300 нм. В слое ультрамелкозернистого (УМЗ) материала размеры зерна варьируются от 300 нм до 1-2 мкм. С дальнейшим увеличением расстояния от поверхности размеры зерна увеличиваются до значений, характерных для поликристаллической (ПК) части тела. Показано, что повышение сопротивления пластическому течению образцов легких сплавов, упрочненных методами поверхностной пластической деформации, обусловлено влиянием формирования полос локализованных пластических сдвигов вблизи поверхностного слоя.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» ГК П666 от 19.05.2010 г., ГК П506 от 13.05.2010 г. и АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» 2.1.2/13526.).

# ОПРЕДЕЛЕНИЕ УДЛИНЕННОСТИ АГРЕГАТОВ В МАГНИТОАНИЗОТРОПНЫХ ГЕЛЯХ <sup>1</sup>

*\*<sup>1</sup>Сорокина О.Н., <sup>1</sup>Бычкова А.В., <sup>1</sup>Коварский А.Л.,*

*<sup>2</sup>Лагутина М.А., <sup>2</sup>Дубровский С.А.*

*<sup>1</sup>ИБХФ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>ИХФ РАН, Москва, Россия*

*\*alsiona@gmail.com*

Магнитные гели могут изменять свою форму и положение под действием магнитных полей и возвращаться к исходному состоянию при снятии поля. Механические свойства таких гелей зависят от распределения наполнителя в матрице. При формировании геля в магнитном поле, были получены гели частицы наполнителя, в которых объединялись в ориентированные линейные структуры. Важной задачей является определение длины агрегатов в гелях. Метод ЭПР парамагнитных индикаторов (ЭПР ПИ) позволил решить эту задачу.

Метод ЭПР ПИ основан на анализе спектров ЭПР низкомолекулярных парамагнетиков, введенных в разбавленные дисперсии магнитных частиц. Форма линии спектра и ее положение зависят от конфигурации локальных магнитных полей в объеме, т.е. от распределения источников полей. Основы теоретической модели спектров ЭПР ПИ и ее апробация на примере стабильного радикала (ТЕМПОЛ) в гидрозоле магнетита представлены в работе [1].

В настоящей работе была проведена проверка применимости метода ЭПР ПИ для исследования агрегирования в магнитных гелях. Магнитные гели на основе полиакриламида и наночастиц магнетита получали во внешнем магнитном поле 1.5 кГс и без него. Показано, что при приготовлении геля в магнитном поле формируются линейные агрегаты магнитных частиц, которые не распадаются после удаления геля из поля. Расчет спектров в рамках предложенной модели позволяет получать удовлетворительное согласие теоретических и экспериментальных спектров ЭПР ПИ в магнитоанизотропных гелях. Используя параметры теоретического спектра, были рассчитаны доля агрегированных частиц ( $\kappa = 60\%$ ) и степень удлинённости агрегатов ( $N_{el} = 12$ ) в гелях. Для сравнения в гидрозоле  $\kappa = 100\%$ , а  $N_{el} = 60$ .

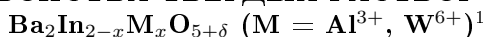
## Литература

- [1] Джебаров Ф.С. Сорокина О.Н. Коварский А.Л. Письма в ЖЭТФ 89, 563 (2009)

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке РФФИ N 11-02-00880.

ПАРЦИАЛЬНЫЕ ПРОВОДИМОСТИ ( $O^{2-}$ ,  $H^+$ ,  $h^{\bullet}$ ),  
ТЕРМИЧЕСКИЕ И СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ  
СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ



*\* Спесивцева И.В., Белова К.Г., Кочетова Н.А.,  
Анимиац И.Е.*

*УрГУ, Екатеринбург, Россия*

*\* ispesivtseva\_usu@e1.ru*

Сложный оксид индата бария состава  $Ba_2In_2O_5[V_o^s]_1$  ( $V_o^s$  – структурная вакансия кислорода) проявляет смешанную кислородно-дырочную проводимость в сухой атмосфере, а во влажной ниже  $600^\circ C$  способен диссоциативно внедрять воду и становиться протонным проводником. В широкой области температур  $Ba_2In_2O_5$  имеет структуру браунмиллерита, где вакансии кислорода упорядочены, поэтому высокие значения как кислородно-ионной, так и протонной проводимости не реализуются. В связи с этим, интересно стабилизировать разупорядоченную высокотемпературную модификацию до более низких температур, при которых происходит образование протонных носителей. Стабилизация может достигаться введением допанта иного радиуса или валентности.

В настоящей работе изучены твердые растворы  $Ba_2In_{2-x}M_xO_{5+\delta}$  ( $M = Al^{3+}, W^{6+}$ ). Установлено, что введение допантов приводит к расширению температурной области существования разупорядоченной структуры. Данные термогравиметрии и масс-спектрометрии показали, что все образцы сохраняют способность внедрения воды. По результатам ИК-спектроскопии вода в структуре твердых растворов находится в форме двух ОН-групп с различной степенью участия в водородных связях, что обусловлено их кристаллографической неэквивалентностью. Электропроводность всех составов, как в сухой, так и во влажной атмосфере существенно повышается по сравнению с  $Ba_2In_2O_5$ . Появление протонных носителей приводит к увеличению общей проводимости на 1–1.5 порядка величины. Анализ зависимостей электропроводности от парциального давления кислорода в атмосферах различной влажности позволил выделить парциальные вклады проводимости. Все твердые растворы имеют смешанную ионно-электронную проводимость со значительным вкладом электронной составляющей  $p$ -типа. Ионная проводимость в сухой атмосфере определяется кислородно-ионным переносом, а в атмосфере с более высоким содержанием паров воды появляется так же протонная составляющая.

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке РФФИ и Федерального агентства по образованию в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 г.

# ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ДИФФУЗИОННЫЕ И ПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА БИГРАФЕНОВЫХ ЛЕНТ <sup>1</sup>

*\*<sup>2</sup>Судоргин С.А., <sup>2</sup>Лебедев Н.Г., <sup>1</sup>Белоненко М.Б.*

*<sup>1</sup>ВИБ, Волгоград, Россия, <sup>2</sup>ВолГУ, Волгоград, Россия*

*\*sergsud@mail.ru*

Выполнен расчет коэффициентов диффузии и проводимости электронов в двухслойной графеновой ленте во внешнем электрическом поле, вектор напряженности которого направлен вдоль ленты. Используется кинетическое уравнение Больцмана в рамках квазиклассического приближения времени релаксации. Получено аналитическое выражение для коэффициента диффузии электронов и выявлена его нелинейная зависимость от поля. Построены и проанализированы зависимости данных коэффициентов от амплитуды поля для различных значений электростатического потенциала между слоями ленты для лент различной ширины.

## Литература

- [1] Novoselov K.S. et al. // Science. 2004. V. 306. P. 666.
- [2] Yanyushkina N.N., Belonenko M.B., Lebedev N.G. // Phys. Scr. 2011. V. 83, P. 015603.
- [3] Белоненко М.Б., Лебедев Н.Г., Демушкина Е.В. // ФТТ. 2008. Т. 50, С. 367.

---

<sup>1</sup>Работа проведена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы (проект № НК-16(3)).

# ВЗАИМОСВЯЗЬ НАМАГНИЧЕННОСТИ $\delta$ -<Mn>-СЛОЯ И ПОЛЯРИЗАЦИИ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КВАНТОВОЙ ЯМЫ InGaAs/GaAs НА ВИЦИНАЛЬНЫХ И СИНГУЛЯРНЫХ ГРАНЯХ GaAs<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Таланцев А.Д., \*<sup>1</sup>Дмитриев А.И., <sup>2</sup>Зайцев С.В.,

<sup>1</sup>Моргунов Р.Б.

<sup>1</sup>ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия, <sup>2</sup>ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия

\*aid@icp.ac.ru

Установлено, что в тонком слое сплава  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$  ( $\delta$ -<Mn>-слое) в гетероструктурах, содержащих квантовую яму InGaAs/GaAs, могут существовать два типа ферромагнитного упорядочения в зависимости от геометрии образцов: в сингулярных образцах, в которых  $\delta$ -<Mn>-слой параллелен плоскости (001) GaAs наблюдается «блеховская» температурная зависимость намагниченности «3/2», в вицинальных образцах с отклонением  $\delta$ -<Mn>-слоя от плоскости (001) GaAs наблюдается «перколяционный» ферромагнитный переход. Температурные зависимости степени поляризации фотолюминесценции и уширение спектров электронного спинового резонанса [1] указывают на зависимость типа ферромагнитного упорядочения от строения  $\delta$ -<Mn>-слоя.

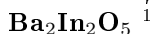
## Литература

- [1] Дмитриев А.И., Моргунов Р.Б., Зайцев С.В. // ЖЭТФ. 2011. Т. 139. С. 367.

---

<sup>1</sup>Работа поддержана грантом Президента РФ МК-1764.2011.3.

# СИНТЕЗ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА НОВЫХ ФТОР-ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ



\* *Тарасова Н.А., Филинкова Я.В., Анимецца И.Е.*

*УрГУ, Екатеринбург, Россия*

\**tarasova-nataliya@yandex.ru*

В настоящее время ведется активный поиск новых высокотемпературных проводников с высокими стабильными значениями проводимости. Среди сложно-оксидных фаз, проявляющих кислородно-ионную либо протонную проводимость, известны сложные оксиды со структурой браунмиллерита  $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_5[\text{V}_0^s]_1$ . Известно, что уровень протонной проводимости определяется состоянием кислородной подрешетки (ее динамикой и степенью разупорядочения), поэтому введение в анионную подрешетку иона с меньшей степенью окисления ( $\text{O}^{2-} \rightarrow \text{F}^-$ ) может повлиять на величину протонной проводимости. Оксифториды как протонные электролиты в литературе практически не описаны, однако можно предполагать, что из-за близости размерных характеристик ионов  $\text{F}^-$  и  $\text{O}^{2-}$  такое замещение возможно и данный подход будет достаточно перспективен.

В рамках данной работы проведено допирование анионной подрешетки  $\text{Ba}_2\text{In}_2\text{O}_5$  фтором. Установлены три области гомогенности  $\text{Ba}_{2-0.5x}\text{In}_2\text{O}_{5-x}\text{F}_x$  ( $0 < x \leq 0,3$ ),  $\text{Ba}_2\text{In}_2\text{O}_{5-y}\text{F}_{2y}$  ( $0 < y \leq 0,24$ ), а также  $\text{Ba}_{2+0.5z}\text{In}_2\text{O}_{5-z}\text{F}_z$  ( $0 < z \leq 0,4$ ). Однофазность подтверждена методом рентгенографической дифракции. Установлено, что составы изоструктурны  $\text{Ba}_2\text{In}_2\text{O}_5$  и характеризуются орторомбической структурой браунмиллерита (пр. гр. *Icmm*).

Для исследуемых составов методом термогравиметрии и масс-спектрометрии исследована возможность внедрения воды из газовой фазы. Проведено исследование температурных зависимостей общей проводимости в атмосферах различной влажности (сухая атмосфера  $p_{\text{H}_2\text{O}}=10^{-5}$  атм, влажная атмосфера  $p_{\text{H}_2\text{O}}=0.02$  атм). Изучена зависимость электропроводности от парциального давления кислорода ( $p_{\text{O}_2}=0,21 \cdot 10^{-20}$  атм) в температурном интервале 600-1000°С. Произведена дифференциация общей проводимости на ионную (кислородно-ионную и фторовую), протонную и электронную проводимости. Проведено обсуждение влияния анионного допирования на транспортные свойства.

---

<sup>1</sup>НИР выполнена при поддержке РФФИ №10-03-01149а и Федерального агентства по образованию в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы.

# КЕРАМИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ СОЕДИНЕНИЙ $A^{II}B^{VI}$ ДЛЯ ОПТИЧЕСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ

*\*Тимонина А.В., Колесников Н.Н., Борисенко Е.Б.,  
Борисенко Д.Н.*

*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*avtim@issp.ac.ru*

Широкозонные II-VI соединения и твердые растворы на их основе находят все более широкое применение с развитием акусто- и оптоэлектроники, ИК-техники. Известные способы получения объемных кристаллов  $A^{II}B^{VI}$  имеют ряд технологических ограничений.

Целью работы было изготовление керамик с однородным фазовым, химическим составом и микроструктурой по нанопорошковой технологии и исследование свойств этих новых объемных материалов.

Нанопорошки CdTe,  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  и  $ZnSe_{1-x}Te_x$ , получали прямым осаждением из газовой фазы. Керамики изготавливали компактированием нанопорошков на машине Instron при комнатной температуре без пластификаторов и смазок. Структуру образцов исследовали с помощью рентгеновской дифрактометрии и электронной микроскопии. Нанопорошки, состоящие из однородных по размеру наночастиц, и керамики, спрессованные из CdTe,  $Cd_{1-x}Zn_xTe$ ,  $ZnSe_{1-x}Te_x$ , содержат смесь кубической и гексагональной фаз.

Исследования влияния прессования и последующих отжигов на фазовый состав, микроструктуру полученных керамик и процессы рекристаллизации в керамических материалах CdTe,  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  [1],  $ZnSe_{1-x}Te_x$  позволили получить объемные материалы со стабильной однофазной кубической структурой, с однородным распределением зерен по размерам для каждого из рассматриваемых соединений. При этом плотность материалов при холодном прессовании - на уровне 98% расчетной плотности.

Разработанная технология изготовления керамических материалов CdTe,  $Cd_{1-x}Zn_xTe$ ,  $ZnSe_{1-x}Te_x$  холодным прессованием позволяет упростить процессы производства и снизить себестоимость элементов для фильтрующей, проходной и фокусирующей оптики ИК-диапазона.

## Литература

- [1] Колесников Н. Н., Е. Б. Борисенко, В. В. Кведер, Д. Н. Борисенко, А. В. Тимонина, А. С. Лысиков, // Деформация и разрушение материалов, 2007, № 12, с. 38-42.



## ПРОИЗВОДСТВО НОВЫХ КОРРОЗИННО СТОЙКИХ КОМПОЗИЦИОННЫХ АЛЮМИНИЕВЫХ МАТЕРИАЛОВ

*\* Ушеренко Ю.С., Шведов С.В., Белоус А.И., Турцевич А.С.  
ОАО «Интеграл», Минск, Республика Беларусь  
\* usherenko@gmail.com*

Эффективным методом производством новых и наноматериалов является высокоэнергетическая обработка. При этой обработке в режиме сверхглубокого проникания в объеме алюминиевого сплава возникает каркас из переплетенных волокон исходного материала и синтезированного материала в канальных зонах[1]. Было установлено, что химический состав синтезированного материала существенно отличается от матричного материала.

На основании цикла выполненных исследований электрохимических свойств материалов полученных при синтезе каркаса (закрытая система) в литейном сплаве АК12 новых химических соединений и элементов установлено, что в процессе динамического введения микродобавок свинца и карбида кремния получены два новых композиционных материала[2].

Электрохимические свойства новых материалов существенно отличаются между собой и по сравнению с исходным сплавом. В период травления 0-1800 минут наибольшей стойкостью обладает исходный материал. Однако на этапе 980-1860 минут, когда «зоны влияния», синтезируемые при введении свинца образуют защитную оболочку, стойкость этого материала на 18% превышает стойкость матричного материала и на 45% стойкость материала сформированного при введении карбида кремния. Показано, что доля «зон влияния» не превышает 11%. Удельная коррозия этих зон при введении свинца в десять раз ниже удельной коррозии исходного материала и синтезированный материал практически не корродирует. Удельная коррозия «зон влияния» в литейном сплаве АК12 при введении карбида кремния в 5,6 раз выше, чем у исходной металлической матрицы.

### Литература

- [1] Андрушевич А.А., Ушеренко С.М., Калиниченко А.С., Белоус А.И. // Материалы 1 Белорусского космического конгресса. - Минск, ОИПИ НАН Б, 2003, с.41-44.
- [2] Usherenko Yu. // Scientific Israel – technological advantages, V.10,2008, №1,2. P.69-74.

## ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТНО МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ ОКСИДА ЖЕЛЕЗА И МАГНИТОЭЛЕКТРОРЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СУСПЕНЗИЙ НА ИХ ОСНОВЕ

<sup>2</sup>*Филиппович Е.А.*, <sup>\*</sup><sup>2</sup>*Ивановская М.И.*, <sup>2</sup>*Котиков Д.А.*,  
<sup>2</sup>*Паньков В.В.*, <sup>1</sup>*Новикова З.А.*, <sup>1</sup>*Коробко Е.В.*,  
<sup>1</sup>*Журавский Н.А.*

<sup>1</sup>*ИТМО, Минск, Беларусь*, <sup>2</sup>*НИИ ФХП БГУ, Минск, Беларусь*  
<sup>\*</sup>*ivanovskaya@bsu.by*

Работа посвящена изучению возможности улучшения магнито- и электрореологических характеристик суспензий на основе ферромагнитных частиц  $\gamma$  -  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  путем модифицирования их поверхности пленочными покрытиями из разных по химической природе оксидов. Исследовали композиты, содержащие в качестве ферромагнитной фазы частицы  $\gamma$  -  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  игольчатой формы ( $d = 75\text{--}110$  нм,  $l = 530\text{--}700$  нм), на поверхности которых методами нанотехнологии были сформированы пленочные слои разной толщины из оксидов с полупроводниковыми ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{SnO}_2$ ,  $\text{In}_2\text{O}_3$ ) и диэлектрическими ( $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) свойствами. Структурные особенности материалов исследовали методами рентгенофазового анализа, электронной микроскопии, ИК-спектроскопии. Сравнивали реологические характеристики суспензий на основе таких материалов при раздельном воздействии магнитного и электрического полей и при их совместном воздействии.

Изучали возможность управления приростом вязкости магнито-электрореологических суспензий (МЭРС) путем регулирования степени кристалличности, плотности упаковки, содержания воды и гидроксильных групп в поверхностных слоях частиц, электрофизических свойств и толщины модифицирующей частицы  $\gamma$  -  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  оксидной пленки  $\text{MO}_x$ .

Исследования показали, что реологические характеристики МЭРС на основе нанокompозитов  $\gamma$  -  $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{MO}_x$  зависят от химической природы оксидной пленки и ее толщины. Наибольший прирост вязкости достигается в электрическом поле при использовании в качестве наполнителя реологической суспензии частиц  $\gamma$  -  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ , поверхностно модифицированных пленкой  $\text{SnO}_2$  (6 мас.%). В магнитном поле эффект повышения вязкости наиболее сильно проявляется для суспензии, содержащей частицы  $\gamma$  -  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  с нанесенной пленкой  $\alpha$  -  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  (6 мас.%). При совместном воздействии магнитного и электрического полей синергетический эффект повышения вязкости наблюдается у всех исследованных композитов при некоторой оптимальной толщине пленочного покрытия.

# СПИНОВАЯ ДИНАМИКА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В $\alpha'$ - И $\beta$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>IBr<sub>2</sub>

Черненкокая А.С., \*Дмитриев А.И., Курман М.В.,  
Моргунов Р.Б.

ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия

\*aid@icp.ac.ru

В работе представлены результаты исследования электронных свойств и спиновой динамики носителей заряда в монокристаллах  $\alpha'$ - и  $\beta$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>IBr<sub>2</sub> методом ЭПР спектроскопии [1]. Установлено, что локализация дырок при  $T = 208$  К в  $\alpha'$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>IBr<sub>2</sub> приводит к резкому изменению параметров спектра ЭПР. При этом форма линии и ее анизотропия не изменяются [2]. Нагрев до температуры 150 °С приводит к структурному фазовому переходу монокристаллов из  $\alpha'$ -фазы в  $\beta$ -фазу, что приводит к искажению формы линии ЭПР из-за примешивания сигнала дисперсии в металлическом состоянии. Магнитная восприимчивость также чувствительна к структурному фазовому переходу  $\alpha' \rightarrow \beta$ . Было исследовано также влияние изотопного замещения (<sup>12</sup>C- $\rightarrow$ -<sup>13</sup>C, H- $\rightarrow$ -D) на электронные процессы в монокристаллах  $\alpha'$ -фазы. В монокристаллах  $\alpha'$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>IBr<sub>2</sub> всех типов (<sup>12</sup>C, <sup>13</sup>C, D) при температурах 20 - 30 К наблюдается температурный гистерезис g-факторов, ширины линий, магнитных восприимчивостей, обусловленный фазовым переходом. Термическая предыстория и образование дефектов при этом дают больший вклад в изменение характеристик температур электронных процессов, чем изотопное замещение.

## Литература

- [1] Моргунов Р.Б., Дмитриев А.И., Черненкокая А.С., Yamamoto K., Yakushi K., Tanimoto Y. // ЖЭТФ. 2010. Т. 138. С. 970.
- [2] Morgunov R., Dmitriev A., Chernenkaya A., Yamamoto K., Yakushi K., Tanimoto Y. // Physica B. 2010. V. 405. P. S138.

# ТРЕХМЕРНО-УПОРЯДОЧЕННЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ МОНОДИСПЕРСНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ЧАСТИЦ <sup>1</sup>

<sup>\*1</sup> *Шевченко Н.Н.*, <sup>1</sup> *Меньшикова А.Ю.*, <sup>1</sup> *Евсеева Т.Г.*,  
<sup>2</sup> *Николенко Д.Ю.*, <sup>2</sup> *Бричкин С.Б.*

<sup>1</sup> *ИВС РАН, Санкт-Петербург, Россия*, <sup>2</sup> *ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*nata\_non@hq.macro.ru*

В настоящее время в полимерной химии остается актуальной задача синтеза монодисперсных частиц способных к самосборке в трехмерно-периодические структуры, а также формирования на их основе новых трехмерных полимерных или композитных материалов перспективных для нанотехнологии. Проведение поисковых работ в области синтеза и самосборки полимерных или композитных частиц позволит установить основные закономерности этого процесса и сформировать в дальнейшем на этой основе иерархические структуры разнообразного состава.

С этой целью методами эмульсионной сополимеризации ряда сомономеров (стирола, метилметакрилата, метакриловой кислоты, N-винилформамида) были получены монодисперсные частицы диаметром 50–500 нм. Смешение водных дисперсий частиц П(Ст-МАК) и наночастиц проводящего полимера полипиррола позволило провести их управляемую агрегацию и сформировать однородные трехмерные структуры. Применение метода динамического светорассеяния и изучение дзета-потенциала частиц позволило детально исследовать процессы управляемой агрегации в зависимости от pH. Кроме того, была проведена модификация частиц П(Ст-МАК) наночастицами CdSe в дисперсии с последующей их самосборкой в трехмерно упорядоченные структуры, что подтверждено методом сканирующей электронной микроскопии, а также спектральными методами анализа.

Получены композиты на основе полимерные микросфер и наночастиц золота. Осаждение золота на поверхность микросфер проводили из водных растворов  $H[AuCl_4]$  путем фотохимического или химического восстановления. Методом СЭМ показано, что только при фотовосстановлении на поверхности полимерных частиц формируется однородный слой наночастиц золота размером менее 40 нм. Таким образом, показаны перспективные подходы к созданию материалов с иерархической структурой путем управления взаимодействием монодисперсных частиц в дисперсиях.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена в рамках гранта Президента Российской Федерации МК-6699.2010.3.

# СОЛИ АЦЕТИЛЕНДИКАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ КАК ПРЕКУРСОРЫ МЕТАЛЛОПОЛИМЕРНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ: СИНТЕЗ И СВОЙСТВА

*Шеринёв В.А., Джардималиева Г.И., \*Помогайло А.Д.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*femtos@mail.ru*

Интерес к неопределённым карбоксилатам ацетиленового типа обусловлен их способностью полимеризоваться в твёрдом состоянии, что определяется малыми расстояниями между реакционными центрами. Наиболее привлекательные для исследований производные дикарбоновых кислот со связями ацетиленового типа - соли ацетилендикарбоновой кислоты. Существует огромное множество структур, включая мономерные соли, линейные и трёхмерные координационные полимеры. В целом комплексы дикарбоновых кислот с бидентатными карбоновыми мостиками между парамагнитными центрами являются эффективными магнитоцентрированными системами. Мы разработали методы синтеза металлосодержащих мономеров на базе ацетилендикарбоновой кислоты и d-элементов (Co(II), Ni(II), Cu(II), Fe(III), Cr(III)). Их свойства, а именно структуру, координацию карбоксильного лиганда, валентность и электронное состояние иона металла были изучены методами ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии, РФЭС, магнитохимии. В ИК спектрах изученных образцов присутствуют пики поглощения при  $1580\text{--}1590\text{см}^{-1}$  и  $1366\text{--}1400\text{см}^{-1}$ , относящиеся к асимметричным и симметричным колебаниям связывающего карбоксилат-иона. Показано, что термические превращения рассмотренных мономеров выявляют уникальный способ получения нанокompозитных материалов - синтез металлополимера, а затем металлосодержащих наночастиц, стабилизированных полимерной оболочкой. Исследованы состав и свойства полученных металлополимерных нанокompозитов.

## Литература

- [1] Dzhardimalieva G.I., Pomogailo A.D., Rozenberg A.S., Leonowicz M. // Chapter in book «Magnetic Nanoparticles». Wiley. 2009.
- [2] Помогайло А.Д., Розенберг А.С., Джардималиева Г.И. // Росс. хим. ж. (Ж. ВХО им. Д.И. Менделеева). 2009. Т. 53. С.140–151.
- [3] Поролло Н.П., Алиев З.Г., Джардималиева Г.И., Ивлева И.Н., Уфлянд И.Е., Помогайло А.Д., Ованесян Н.С. // Изв. АН, сер. хим. 1997. №2. С. 375–382.

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ ТИТАНОВЫХ ОБРАЗЦОВ ПО ДИНАМИЧЕСКОЙ СХЕМЕ КАНАЛЬНО-УГЛОВОГО ПРЕССОВАНИЯ <sup>1</sup>

*\* Шипачев А.Н., Суглобова И.К., Зелепугин С.А.  
ТГУ, Томск, Россия  
\*alex18023@mail.ru*

В данной работе процессы деформирования образцов при их движении по пересекающимся каналам исследуются численно методом конечных элементов в плоскодеформационной постановке в рамках упругопластической модели среды.

Процесс динамического деформирования моделировали на примере образцов из титана шириной 16 мм и длиной 65 мм. Начальная скорость образцов варьировалась в диапазоне 100 – 400 м/с, давление на пуансон  $P_0 = 0,1 - 0,3$  ГПа. Угол пересечения каналов  $90^\circ$ . В области внешнего угла стенок задана наклонная площадка, составляющая с осями декартовой системы координат угол  $45^\circ$ .

Проведен анализ полей удельной энергии пластических деформаций и удельного объема микрповреждений. Определены эффективные начальные параметры процесса (скорость, давление на пуансон), при которых обеспечивается прохождение образцов по каналам и их целостность в зависимости от материала образца. На основании полученных результатов расчетов установлено, что интенсивность пластических деформаций (и, как следствие, измельчение структуры) титанового образца после одного цикла динамического канально-углового прессования (ДКУП) неравномерна по образцу, что свидетельствует о необходимости дополнительных циклов ДКУП.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 10-08-00516-а).

**ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА ПРОЦЕССОВ  
ОБРАЗОВАНИЯ И МОДИФИКАЦИИ  
ПОЛИМЕРОВ**

# МОДИФИЦИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ПЛЕНОК ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА И СОПОЛИМЕРА ВИНИЛИДЕНФТОРИДА С ГЕКСАФТОРПРОПИЛЕНОМ В РАЗРЯДЕ ПОСТОЯННОГО ТОКА <sup>1</sup>

*Батуашвили М.Р., Пискарев М.С., Яблоков М.Ю.,*

*\*Гильман А.Б., Кузнецов А.А.*

*ИСПМ РАН, Москва, РФ*

*\*plasma@ispm.ru*

Известно, что полифторолефины характеризуются комплексом ценных физико-химических свойств, обладая одновременно низкими контактными свойствами. В этой связи для использования фторсодержащих полимеров в различных областях техники необходимо модифицирование их поверхностных свойств.

В работе проведено исследование процессов модифицирования пленок сополимера винилиденфторида с гексафторпропиленом (Ф-62) и поливинилиденфторида (ПВДФ) в тлеющем разряде постоянного тока в атмосфере остаточного воздуха ( $p=13$  Па). Изучено влияние параметров разряда (ток, время обработки, расположение пленки на катоде и аноде) на величину краевого угла смачивания ( $\theta$ ), измеренного гониометрическим методом по двум жидкостям (бидистилляту и глицерину). На основании полученных данных проведены расчеты работы адгезии, полной поверхностной энергии, ее полярного и дисперсионного компонентов. Показано, что обработка в разряде постоянного тока приводит к существенной гидрофилизации поверхности исследованных фторполимеров. Найдено, что для полифторолефинов, в состав которых входят не только атомы фтора, но и атомы водорода, модифицирование на катоде является более эффективным, чем на аноде, тогда как для ПТФЭ более эффективна обработка на аноде. Установлено, что при хранении модифицированных пленок на воздухе наблюдается постепенное увеличение  $\theta$  с выходом на плато через 14 суток, однако даже через месяц значения  $\theta$  остаются  $< 60^\circ$ , то есть поверхность имеет гидрофильный характер. С помощью метода рентгенофотоэлектронной спектроскопии показано, что воздействие разряда приводит к уменьшению содержания фтора в поверхностном слое полимера и образованию кислородосодержащих групп различной структуры. С этим, вероятно, связано изменение поверхностных свойств модифицированных пленок.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН № 7 и гранта Президента РФ НШ-4371.2010.3.



## НАНОМАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ТРИАЦЕТАТА ЦЕЛЛЮЛОЗЫ И ПОЛИИОНЕНОВ

*\* Бурмістр О.М., Свердліковська О.С., Бурмістр М.В.,  
Шапка В.Х.*

*ГВУЗ УГХТУ, Днепропетровск, Украина*

*\*Olylyna@rambler.ru*

Пленочные наноматериалы представляют одну из наиболее перспективных областей полимерной химии. В настоящее время значительно вырос спрос на полимерные материалы с улучшенными свойствами. Наиболее эффективным способом получения наноматериалов с заданными функциями и свойствами является модификация известных полимеров. Актуальной проблемой химии высокомолекулярных соединений является синтез новых полиионенов (ПИ) из доступного экологически чистого сырья, что позволяет расширить область применения полимеров. В данной работе впервые проведено системное исследование влияния новых малых добавок ПИ на основе оксирановых соединений, формулы которых представлены в [1], [2], на реологические, теплофизические, физико-механические и диэлектрические свойства композиции триацетата целлюлозы (ТАЦ). Показано, что исследуемые ПИ уменьшают динамическую вязкость растворов ТАЦ в 4,5 – 15,5 раза. Определено, что оптимальное содержание модифицирующих добавок в композиции ТАЦ составляет 0,01 – 0,05% от массы ТАЦ. Установлено, что исследуемые добавки повышают прочность и твердость пленок ТАЦ в 1,6 – 2,6 раза и в 1,2 – 1,4 раза, соответственно. Показано, что введение ПИ в композицию ТАЦ приводит к увеличению удельной теплоемкости в исследуемом температурном интервале на 5 – 85%. Установлено, что удельное объемное сопротивление композиции на основе ТАЦ, модифицированной ПИ составляет  $10^{15}$ М, а удельное объемное сопротивление –  $10^{14}$ Ом.

### Литература

- [1] Бурмістр О.М., Свердліковська О.С., Бурмістр М.В., Шапка В.Х. // Вопросы химии и химической технологии «Синтез мономерів на основі оксиранових сполук і полііоненів на їх основі». 2009. № 3. С. 37–43.
- [2] Бурмістр О.М., Свердліковська О.С., Бурмістр М.В., Шапка В.Х. // Вопросы химии и химической технологии «Дослідження в'язкозиметричних властивостей полііоненів на основі оксиранових сполук ». 2009. № 9. С. 43–48.

# ВЫСОКОНАПОЛНЕННЫЕ КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА И НАНОДИСПЕРНЫХ ЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ С ОКСИДНЫМ БАРЬЕРНЫМ ПОКРЫТИЕМ<sup>1</sup>

<sup>\*2</sup>*Валетдинов Д.А.,* <sup>2</sup>*Кудинова О.И.,* <sup>2</sup>*Гринев В.Г.,*  
<sup>2</sup>*Крашенинников В.Г.,* <sup>1</sup>*Чмутин И.А.,* <sup>2</sup>*Дубникова И.Л.,*  
<sup>2</sup>*Новокишова Л.А.*

<sup>1</sup>*ИНАТ МФК, Москва, Россия,* <sup>2</sup>*ИХФ РАН, Москва, Россия*

*\*lnov@chph.ras.ru*

Введение дисперсных металлов в полимерные матрицы позволяет создавать полимерные композиционные материалы, сочетающие в себе достоинства металлов и полимеров. Применение метода полимеризации *in situ* позволило нам создать новые высоконаполненные (до 30-50 об.% наночастиц) полимерные наноконпозиционные материалы на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) и нанодисперсного алюминия, сочетающие диэлектрические и теплопроводящие свойства.

В качестве наполнителя на данном этапе работы применен нанодисперсный алюминий с барьерным покрытием в виде оксида алюминия на поверхности частиц. Введение наполнителя в полимер проводили непосредственно на стадии его синтеза путем активации поверхности наночастиц алюминия катализатором полимеризации и последующей полимеризации этилена. Исследованы электрофизические свойства полученных наноконпозиционных материалов. Показано, что наноконпозиаты являются хорошими диэлектриками с удельной электропроводностью на постоянном токе в интервале  $10^{-16}$ - $10^{-14}$  (Ом см)<sup>-1</sup>. Исследованы динамические механические характеристики полученных наноконпозиатов в зависимости от температуры в интервале -165С ÷ +150С. Показано, что динамический модуль композиатов существенно превышает модуль ненаполненного полимера во всем температурном диапазоне. Отмечены особенности в области релаксационных  $\alpha$ -переходов, появляющиеся для высоконаполненных наноконпозиатов. Показано, что композиаты с наноразмерными частицами Al обладают более высоким модулем, чем с микронными частицами, при одинаковых степенях наполнения. Материалы ориентированы на использование в электротехнической, электронной отраслях промышленности, в частности для изготовления радиаторов охлаждения и корпусов электронных компонентов.

---

<sup>1</sup>Работа выполняется при поддержке ГК Роснауки 02.740.11.0406, гранта Президиума РАН 27.

# ВЛИЯНИЕ АГРЕССИВНЫХ СРЕД НА СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ БИОКОМПОЗИТОВ СОПОЛИМЕРА ПОЛИ(3-ГИДРОКСИБУТИРАТ-СО-3-ГИДРОКСИВАЛЕРАТ)а И СЕГМЕНТИРОВАННОГО ПОЛИУРЕТАНА <sup>1</sup>

*\*<sup>3</sup>Кленина Н.С., <sup>1</sup>Карпова С.Г., <sup>3</sup>Шершнев В.А.,  
<sup>2</sup>Иорданский А.Л.*

*<sup>1</sup>ИБХФ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>ИХФ РАН, Москва, Россия, <sup>3</sup>МИТХТ  
им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*\*kleonik@mail.ru*

Представитель новейшего класса полиоксисилканоатов - бактериальный сополимер 3-гидроксibuтирата и 3-гидроксивалерата (ПГБВ) характеризуется уникальным сочетанием биodeградации, биосовместимости и механических характеристик, что позволяет предложить его как альтернативу синтетическим полимерам в медицине и в упаковочной промышленности. Особенно актуальным представляется использование ПГБВ в фармакологии, для изготовления терапевтических систем для направленного транспорта лекарственных веществ. Однако, повышенная хрупкость и высокая стоимость ПГБВ пока еще ограничивают его широкое использование. Получение и контроль структуры композиций ПГБВ с рядом других синтетических полимеров направлено на улучшение эксплуатационных характеристик и снижение затрат на получение новых терапевтических систем.

В докладе представлены результаты исследования биокomпозитов на основе ПГБВ (Тянан Китай) и сегментированного полиуретана (СПУ) биомедицинского назначения.

Анализ данных ЭПР-спектроскопии и дифференциально-сканирующей калориметрии позволили определить зависимость структурно-динамических параметров системы от соотношения компонентов в исходной смеси, а также выявить изменения в структуре биокomпозита при предварительном температурном воздействии в водной среде и экспозиции в атмосфере озона. Эти изменения необходимо учитывать при выборе способов стерилизации и дальнейшей эксплуатации биомедицинских изделий на основе ПГБВ и СПУ.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН РФ "Фундаментальные науки - медицине", и программы Отделения РАН РФ "Создание макромолекулярных структур новых поколений".

## ТЕРМООКИСЛИТЕЛЬНАЯ ДЕСТРУКЦИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА И ЭТИЛЕНПРОПИЛЕНОВЫХ СОПОЛИМЕРОВ

*\* Корж Н.Н., Шибряева Л.С., Попов А.А.*

*ИБХФ РАН, Москва, Россия*

*\*korzh1977@rambler.ru*

Композиции на основе полипропилена (ПП) и каучуков - двойных сополимеров этилена и пропилена (СКЭП), являются основной составной частью полимерных термоэластопластов (ТЭП). В процессе переработки и эксплуатации они подвергаются воздействию высоких температур и кислородной среды, что вызывает в полимерах различные термоокислительные процессы

Целью данной работы было выявление особенностей влияния структуры на окисление смесей ПП –ЭПМ и ПП –СКЭП. В данной работе были исследованы указанные выше композиции различного состава. ЭПМ, имеет структуру, аналогичную сополимерной цепи СКЭП, обладает низкой молекулярной массой.

В маслонаполненных образцах ЭПМ преимущественно локализовалось в межсферолитном пространстве, образуя при фазовом расслаивании, межфазную границу, с возникновением напряжений на проходных межсферолитных цепях ПП. В смесях ПП-СКЭП также наблюдалось фазовое расслаивание, но за счёт образования межфазного слоя и большей молекулярной массы СКЭП, в данных композитах легче протекали релаксационные процессы.

Указанные различия в структуре исследованных композиций значительно отразились на их реакционной способности. Так в композициях ПП-ЭПМ реакционная способность материала падала за счёт ограничения маслом доступа кислорода к ПП матрице. При этом в продуктах окисления преобладали, в основном, карбонилсодержащие продукты, что свидетельствует о преимущественно термоокислительной деструкции ПП. В отличие от ПП-ЭПМ, композиция ПП-СКЭП окислялась по более сложному механизму. Периоды интенсивного окисления сменялись у нее резким замедлением, что может свидетельствовать о совместном окислении компонентов и наличия перекрестных реакций между ПП и СКЭП

Таким образом, можно сказать, что формирование межфазной границы в композитах ПП-ЭПМ приводит преимущественно к деструкции полимера, а формирование межфазного слоя - к совместному окислению полимеров.

# ВЛИЯНИЕ СМЕСЕВОЙ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА И УГЛЕРОДНЫХ НАНОПОЛНИТЕЛЕЙ НА ИХ СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА<sup>1</sup>

<sup>\*2</sup> *Кувардина Е.В.*, <sup>2</sup> *Дубникова И.Л.*, <sup>2</sup> *Новокшинова Л.А.*,  
<sup>2</sup> *Крашенинников В.Г.*, <sup>1</sup> *Ломакин С.М.*, <sup>3</sup> *Абрамчук С.С.*  
<sup>1</sup> *ИБХФ РАН, Москва, Россия*, <sup>2</sup> *ИХФ РАН, Москва, Россия*, <sup>3</sup> *МГУ*  
*им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*  
*\*janekuardina@yandex.ru*

Создание композиционных материалов с повышенной жесткостью, тепло- и электропроводностью на основе углеродных нанонаполнителей является интересной и перспективной задачей. На данном этапе основные успехи в этой области достигнуты для материалов на основе полярных полимеров. В случае неполярных мы встречаемся с проблемой совместимости наполнителя с матрицей и его низкой степенью диспергирования. В этой связи существует задача повысить однородность распределения частиц в полимерной матрице. В нашей работе данная задача решалась путем применения промышленной технологии приготовления концентратов и их дальнейшего разбавления.

В работе исследовали два типа углеродных нанонаполнителей с волокнистой (многостенные углеродные нанотрубки – МУНТ) и пластинчатой формой частиц (нанопластины эксфолиированного графита - НПЭГ). Материалы получали на лабораторном двухроторном смесителе типа «Брабендер» методом смешения в расплаве. В качестве матрицы использовали полипропилен. Была исследована структура полученных материалов методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и ДСК, а также механические (Инстрон) и динамические-механические свойства композиций (ДМА). Кроме того, получены данные по термостабильности образцов методом ТГА. Цель работы состояла в изучении эффекта разбавления и его влияния на структуру, механические и термические свойства материалов на основе углеродных нанонаполнителей.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке грантов ОХНМ РАН, РФФИ-офи-м № 09-03-12232 и ФЦП-НОЦ ГК 02.740.11.0406.

# КИНЕТИКА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В СМЕСЯХ ОЛИГОМЕРОВ И ПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ (3,3-БИС-(АЗИДОМЕТИЛ)ОКСЕТАНА) - БАМО И (3-АЗИДОМЕТИЛ-3-МЕТИЛОКСЕТАНА) - АММО<sup>1</sup>

<sup>\*1</sup> Кулагина Г.С., <sup>1</sup> Ольхова О.М., <sup>1</sup> Бадамшина Э.Р.,  
<sup>2</sup> Писарев С.А., <sup>2</sup> Чалых А.Е.

<sup>1</sup> ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия, <sup>2</sup> ИФХЭ РАН, Москва, Россия  
\*gskulagina@rambler.ru

Ранее нами были выполнены исследования фазовых равновесий в смесях: аморфный олиго/полиАММО и кристаллизующийся олиго/полиБАМО [1]. Построены обобщенные диаграммы фазовых и физических состояний. Показано, что системы характеризуются сложным аморфно-кристаллическим равновесием, причем в зависимости от ММ компонентов ВКТР находится либо выше, либо ниже линии ликвидуса.

Целью данной работы являлось исследование процесса кристаллизации олиго/полиБАМО в зависимости от его ММ, а так же от положения фигуративной точки на диаграммах состояния систем олиго/полиАММО–олиго/полиБАМО.

Методом оптической поляризационной микроскопии изучена кинетика кристаллизации олиго/полиБАМО и его смесей с олиго/полиАММО в изотермических условиях при различных степенях переохлаждения из расплава. Более детально морфологию кристаллов изучали с помощью просвечивающей электронной микроскопии.

Оптические микрофотографии массовой кристаллизации были обработаны с точки зрения количества пропущенного света, характеризующего долю кристаллической фазы. Получены кинетические зависимости процесса, определены индукционные периоды и скорости массовой кристаллизации. Установлено влияние ММ, степени переохлаждения и состава смеси на кинетику кристаллизации олиго/полиБАМО.

## Литература

- [1] Кулагина Г.С., Ольхова О.М., Хасбиуллин Р.Р., Матвеев В.В., Михайлов Ю.М., Чалых А.Е., Бадамшина Э.Р // Высокомогл. Соед. 2011. направлена в печать

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований отделения химии и наук о материалах РАН (проект 4ОХ)

# КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РЕАКЦИЙ ПЕРЕНОСА ЦЕПИ ПРИ ТЕЛОМЕРИЗАЦИИ ТЕТРАФТОРЭТИЛЕНА В РАЗЛИЧНЫХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

*\* Куница А.А., Шестаков А.Ф., Ким И.П.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\* akunitsa@icp.ac.ru*

Теоретическое и экспериментальное исследование процессов теломеризации тетрафторэтилена (ТФЭ) – важный шаг на пути к разработке технологии получения фторполимерных покрытий наноразмерной толщины. Это обуславливает поиск адекватного теоретического метода определения энергетических параметров элементарных стадий процесса теломеризации.

Для определения активационных барьеров реакций переноса цепи при теломеризации ТФЭ с различными телогенами ( $CH_3OH$ ,  $C_2H_5OH$ , ТГФ,  $(C_2H_5)_2O$ ,  $C_2H_5C(O)H$ ,  $(CH_3)_2C(O)$ ,  $CH_3C(O)C_2H_5$ ,  $CCl_4$ ,  $CH_3C(O)OC_2H_5$ ,  $(HCOOH)_2$ ) был применен метод функционала плотности с обменно-корреляционным функционалом РВЕ и расширенным базисом для псевдопотенциала SBK. Для каждого телогена были исследованы все возможные пути отрыва атома водорода, и был выявлен наиболее кинетически выгодный процесс.

Результаты расчёта позволили разделить телогены на две группы в зависимости от энергии активации реакции отрыва атома водорода (для первой группы среднее значение классической энергии активации составляет 1,7 ккал/моль, а для второй – 6,4 ккал/моль).

Реакции переноса цепи с участием соединений первой группы ( $C_2H_5C(O)H$ , ТГФ,  $C_2H_5OH$ ,  $(C_2H_5)_2O$ ,  $CCl_4$ ,  $CH_3OH$ ) имеют небольшие активационные барьеры. Можно ожидать, что соответствующие процессы теломеризации будут давать теломеры с небольшой длиной цепи. Напротив, продукты теломеризации с участием соединений второй группы ( $CH_3C(O)C_2H_5$ ,  $CH_3C(O)OC_2H_5$ ,  $(CH_3)_2C(O)$ ,  $(HCOOH)_2$ ) будут иметь большое число звеньев ТФЭ вследствие небольших скоростей реакций переноса цепи на молекулу растворителя. Эти выводы качественно согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Таким образом, выбранный вариант теории функционала плотности позволяет делать предсказания, необходимые на этапе планирования эксперимента.

# ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ИК-СПЕКТРОЭЛЛИПСОМЕТРИИ (ИК-СЭ) СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛИТЕТРАФТОРЭТИЛЕНА, МОДИФИЦИРОВАННОЙ В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЕ <sup>1</sup>

<sup>\*2</sup> *Макеев М.О., <sup>2</sup>Иванов Ю.А., <sup>2</sup>Мешков С.А.,  
<sup>1</sup>Гильман А.Б., <sup>1</sup>Яблоков М.Ю.*

<sup>1</sup> *ИСПМ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва,  
Россия*

*\*mc.stiv@gmail.com*

Политетрафторэтилен (ПТФЭ) обладает высокими диэлектрическими характеристиками, термо- и химической стойкостью, но также имеет плохие контактные свойства, что ограничивает его применение во многих отраслях промышленности. Для улучшения контактных свойств используют процесс модификации в низкотемпературной плазме, важной особенностью которого является то, что изменениям подвергается наноразмерный поверхностный слой, толщина которого по разным оценкам составляет от 20 нм до нескольких микрон.

В данной работе методом ИК-СЭ проведено определение толщины модифицированного в плазме слоя образца ПТФЭ, изучено изменение его шероховатости, а также химической структуры и оптических констант. Модификацию проводили в разряде постоянного тока на аноде (рабочий газ – воздух,  $P=13$  Па,  $I=50$  мА,  $t=60$ с).

Исследование образцов ПТФЭ (40·50 мм, толщина 10мм) проводили с помощью эллипсометра IR-VASE (диапазон длин волн от 300 до 4000 см<sup>-1</sup>, спектральное разрешение 32 см<sup>-1</sup>, углы падения света на образец 60 и 70°). Химическую структуру поверхности ПТФЭ изучали с помощью Фурье-ИК-спектрометра «Bruker Equinox 50S» с приставкой MIRacle Single Reflection Horizontal ATR с кристаллом ZnSe.

Было установлено, что в результате модификации в плазме толщина шероховатого слоя ПТФЭ уменьшается от  $380 \pm 20$  нм до  $353 \pm 15$  нм, а толщина химически модифицированного слоя под шероховатым составляет  $732 \pm 37$  нм. Общая толщина модифицированного слоя равна  $1085 \pm 37$  нм. Получены зависимости показателей преломления  $n$  и поглощения  $k$  от волнового числа для модифицированного в плазме и исходного ПТФЭ. Методом ИК-СЭ показано, что под воздействием разряда на поверхности ПТФЭ образуются новые кислородсодержащие группы и уменьшается количество фтора.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН № 7 «Разработка методов получения химических веществ и создание новых материалов».



# ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ РАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИИЗОЦИАНУРАТОВ ПРИ ПОЛИЦИКЛОТРИМЕРИЗАЦИИ ИЗОФОРОНДИИЗОЦИАНАТА

*\*Малков Г.В., Джалмуханова А.С., Лодыгина В.П.,  
Комратова В.В., Бадамшина Э.Р.  
ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия  
\*gmalkov@icp.ac.ru*

Полициклотримеризация (ПЦТ) различных изоцианатов широко используется для создания термостабильных сетчатых материалов и покрытий на их основе. Не следует забывать, что продуктами ПЦТ диизоцианатов вблизи точки геля являются смеси олиго- и полимеров различной степени ветвления, которые, как и многие разветвленные полимеры, должны обладать комплексом интересных и потенциально полезных свойств. Стоит отметить, что в основном от разницы в реакционной способности изоцианатных групп зависит доля высоко-разветвленных продуктов ПЦТ [1].

Одним из широко используемых диизоцианатов с неэквивалентными по химическому окружению и по реакционной способности группами является изофорондиизоцианат (ИФДИ), однако данных о кинетических закономерностях его ПЦТ крайне мало.

В данной работе представлены результаты исследования кинетических параметров ПЦТ ИФДИ в массе, в растворах толуола, в присутствии различных каталитических систем, а также результаты охарактеризации полученных разветвленных полиизоциануратов методами ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ , ИКС, ЭЖХ. Показаны основные преимущества использования ИФДИ при синтезе разветвленных полиизоциануратов.

## Литература

- [1] Иржак Т.Ф., Иржак В.И., Малков Г.В., Эстрин Я.И., Бадамшина Э.Р. // Высокомолек. соед. Сер. А. 2008. Т. 50. С. 91.

# О РОЛИ ДВУХКВАНТОВЫХ ФОТОПРОЦЕССОВ В РЕКОМБИНАЦИОННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ПРИ ФОТОЛИЗЕ ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДОВ

*Мамыкин Д.А., \* Антипин В.А.*

*ИОХ УНЦ РАН, Уфа, Россия*

*\*antipin@anrb.ru*

Облучение плёнок класса полиарилефталидов (ПАФ) полидифениленфталидом (ПДФ) и полифлуорениленфталидом (ПФФ) УФ- и видимым светом приводит к появлению длительного послесвечения (ПС) с максимумом в области 450-550 нм [1], [2]. Спектры фотолюминесценции (ФЛ) этих ПАФ имеют две полосы: 350 и  $\sim 500$  нм, полосы поглощения: 200 и 280-313 нм. Затухание интенсивности ПС следует гиперболическому закону  $I=(1+bt)^{-c}$  ( $c\sim 2$ ), что свидетельствует о рекомбинационном механизме ПС. Анализ исследованных зависимостей начальных интенсивностей кривых затухания ПС от освещённости показал их квадратичную зависимость  $I_0 \sim E^2$ , что является кинетическим признаком двухквантовых процессов ионизации с участием триплетных состояний в ПАФ [3], [4]. Это подтверждается наличием в спектрах возбуждения ПДФ и ПФФ длинноволновых полос в области 420 нм отсутствующих в спектрах поглощения и связанных с триплетными состояниями фрагментов полимерной цепи. При облучении часть синглетно-возбуждённых молекул ПАФ за счёт интеркомбинационной конверсии заселяет триплетные состояния, что способствует поглощению ими второго фотона и переходу их в высоковозбуждённое состояние. Энергии этих состояний становится достаточно как для ионизации, так и для разрыва связей в молекуле ПАФ и генерации радикалов.

## Литература

- [1] Антипин В.А., Мамыкин Д.А., Лачинов А.Н., Ковалёв А.А., Остахов С.С., Салазкин С.Н., Казаков В.П. // ХВЭ. 2010. Т.44. №4. С.340.
- [2] Антипин В.А., Мамыкин Д.А., Лачинов А.Н., Ковалёв А.А., Остахов С.С., Шапошникова В.В., Салазкин С.Н., Казаков В.П. // ХВЭ. 2010. Т.44. №4. С.345.
- [3] Бандасарьян Х.С. // Двухквантовая фотохимия. М.: Наука. 1976. С.128.
- [4] Плотников В.Г., Смирнов В.А., Алфимов М.В. // ХВЭ. 2009. Т.43. №4. С.291.

# СУПЕРИОННЫЕ ПОЛИМЕРНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

*Моцарь А.С.*  
*СГТУ, Саратов, Россия*  
*motsaras@yandex.ru*

В настоящее время в мире широко ведутся исследования процессов, происходящих в полимерных суперионных материалах – полимеров, обладающих высокой ионной проводимостью, сравнимой с проводимостью растворов электролитов или расплавленных солей.

Получение полимерных материалов проводили золь-гель методом. При этом образуется высокодисперсная среда с распределенным в структуре растворителя активным проводящим компонентом.

В качестве растворителя нами был выбран раствор полиакрилонитрила в диметилформамиде. Смесь полимера с органическим растворителем готовили заранее, полное растворение полимера наблюдается через сутки. Далее, в реакционной среде растворяли навеску сульфосалициловой кислоты. Для достижения полного распределения проводящих компонентов в растворителе применяли конденсационные методы получения золя. Полученный золь формировали в пленки на чашках Петри. Структурирование (гелеобразование) исследуемых материалов происходит через сутки после приготовления золя.

Исследование свойств полученных полимерных материалов проводили в электрохимических ячейках на импедансметре «Элинс Z-350M». Электролит при этом помещали в ячейку из органического стекла и с помощью поджимного устройства зажимали между титановыми пуансонами. Рабочий интервал частот от 100 Гц до 1 МГц. Полученные данные анализировались графоаналитическим методом [1].

Исследование показало наличие в системе коэффициента Варбурга ( $W$ ), что дает основание полагать о присутствии диффузии проводящей составляющей в исследуемых полимерных материалах, что является важной составляющей для построения на основе этих систем устройств для электротехники и электроники.

## Литература

- [1] Укше Е.А., Букун Н.Г., «Твердые электролиты». – М.: Наука, 1977 – 176 с.

## ОРГАНОМОДИФИКАЦИЯ МОНТМОРИЛЛОНИТА ДЛЯ СОВЕРШЕНСТВОВАНИЯ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА НАНОКОМПОЗИТОВ

<sup>\*2</sup> *Назирова О.Д.*, <sup>2</sup> *Бревнов П.Н.*, <sup>2</sup> *Крашенинников В.Г.*,

<sup>2</sup> *Новокишнова Л.А.*, <sup>3</sup> *Покидько Б.В.*, <sup>1</sup> *Щербина М.А.*

<sup>1</sup> *ИСПМ РАН, Москва, Россия*, <sup>2</sup> *ИХФ РАН, Москва, Россия*,

<sup>3</sup> *МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

\* *oks.nazirova@yandex.ru*

Нанокomпозиты на основе монтмориллонита (ММТ) обладают уникальными комплексами физико – механических и эксплуатационных свойств. Для достижения максимального улучшения свойств нанокomпозитов важно достичь максимальной эксфолиации частиц наполнителя на слои нанометровой толщины в полимерной матрице. Эффективным способом синтеза нанокomпозитов с высокой степенью эксфолиации ММТ является метод интеркаляционной полимеризации, который был применен нами в данной работе.

Целью данной работы является исследование влияния природы ММТ, типа органо-модификатора, а также его количества на структуру получаемого модифицированного ММТ – увеличение межслоевого расстояния в частицах ММТ и однородность получаемых интеркалированных частиц.

Были сопоставлены ММТ Cloisite C20A “Southern Clay Products” (США) и бентонит Даш – Салахнинский Аз – 4 (Азербайджан). Для модификации применяли индивидуальное соединение диметилдиоктадецил аммоний бромид (ДОДАБ) и смесь замещенных четвертичных солей аммония с длинной алкильных заместителей  $C_{14} - C_{18}$ . Органо-модифицированные образцы были исследованы методами ТГА, ДСК и РСА в больших и малых углах. Показано, что применение индивидуального модификатора ДОДАБ, содержащего длинные ( $C_{18}$ ) алкильные заместители приводит к значительно более сильному увеличению межслоевого расстояния в частицах ММТ (до 3,6-3,8 нм), чем достигается (2,5-2,8 нм) при тех же содержаниях модификатора в случае смешанных замещенных четвертичных солей аммония. Полученные результаты указывают на разный характер упаковки молекул используемых модификаторов между слоями ММТ. Была исследована хемосорбция компонентов металлорганических катализаторов на полученных органо-модифицированных наполнителях и активность образующихся систем в полимеризации этилена. По данным РСА, при использовании обоих типов слоистых силикатов с разным содержанием органо-модификатора достигается практически полная эксфолиация частиц на нанослой в синтезированной полимерной матрице

## КАТИОННАЯ СОПОЛИМЕРИЗАЦИЯ ЗАМЕЩЕННЫХ ОКСЕТАНОВ

<sup>2</sup>Поклад С.В., \*<sup>1</sup>Тарасов А.Е., <sup>1</sup>Ольхова О.М.,

<sup>1</sup>Эстрин Я.И., <sup>1</sup>Бадамшина Э.Р.

<sup>1</sup>ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия, <sup>2</sup>РХТУ им. Д.И. Менделеева,  
Москва, Россия

\*atarasov@icp.ac.ru

Олигодиолы на основе замещенных оксетанов, в частности, 3,3-бис-(азидометил)оксетана (БАМО) и 3-азидометил-3-метилоксетана (АММО) находят применение для получения полиуретановых блок-сополимеров. В настоящее время большое внимание уделяется оксетановым блок-сополимерам неуретанового типа, путь получения которых заключается в катионной сополимеризации оксетановых мономеров симметричного (БАМО) и несимметричного (АММО) строения. В этом случае блоки, образованные БАМО, выступают в качестве жестких, а АММО – мягких блоков. Существенное значение для синтеза сополимеров БАМО-АММО приобретают вопросы определения констант сополимеризации и выявления возможности получения сополимеров достаточно большой молекулярной массы.

В связи с этим целями настоящей работы являются определение констант сополимеризации АММО и БАМО под действием эфирата трехфтористого бора и подбор условий процесса для получения сополимера максимальной молекулярной массы.

Определение констант сополимеризации осуществлялось с использованием метода ИК-спектроскопии, а именно, из калибровочной зависимости  $\alpha$  от концентрации одного из мономеров в сополимере установлен состав сополимеров при конверсии не более 10 % (где  $\alpha$  – отношение полосы поглощения валентного колебания азидной группы к полосе поглощения валентного колебания эфирной группы). Константы сополимеризации исследуемых мономеров равняются  $r_{\text{БАМО}} = 0.15$ ,  $r_{\text{АММО}} = 3.58$ . Очевидно, что в результате сополимеризации этих мономеров образуется неоднородный по составу сополимер.

При изменении условий сополимеризации установлено, что молекулярную массу получаемых продуктов можно легко контролировать изменением температуры полимеризации, поскольку с понижением температуры снижается относительная скорость реакции обрыва – основной реакции ограничения роста цепи. Так, при проведении реакции при 20°C образуется сополимер с  $M_n = 5000$  и индексом полидисперсности равным 2.1, а при температуре –17°C  $M_n = 60000$ , при этом полимер не содержит низкомолекулярных фракций, индекс полидисперсности составляет 1.6.

# КОНТРОЛИРУЕМАЯ РАДИКАЛЬНАЯ ФОТОПОЛИМЕРИЗАЦИЯ ВИНИЛАЦЕТАТА В ПРИСУТСТВИИ КОМПЛЕКСА $\text{Co(II)}$

\*<sup>2</sup>*Свидченко Е.А.*, <sup>2</sup>*Сури́н Н.М.*, <sup>2</sup>*Кузнецов А.А.*,  
<sup>2</sup>*Семенова Г.К.*, <sup>1</sup>*Сиган А.Л.*

<sup>1</sup>*ИНЭОС РАН, Москва, Россия*, <sup>2</sup>*ИСПМ РАН, Москва, Россия*

\**evgensv@yandex.ru*

С недавнего времени комплексы  $\text{Co(II)}$  успешно применяются для контроля полимеризации винилацетата (ВА) (процесс CMRP – Cobalt Mediated Radical Polymerization) [1]. В качестве источника радикалов чаще всего используется низкотемпературный азоинициатор, который труднодоступен и требует специальных условий хранения.

В настоящей работе полимеризация ВА проводилась в присутствии комплекса  $\text{Co}^{II}(\text{salen})$  ( $\text{C}_{16}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O}_2\text{Co}$ , salen - салицилиденэтилендиамин), а радикалы генерировались при фотооблучении мономера светом с длиной волны 240-320 нм. По спектрофотометрическим данным подтверждено образование *in situ* «спящих» цепей ПВА- $\text{Co}^{III}(\text{salen})$ . Процесс имеет типичные признаки контролируемой полимеризации, молекулярная масса ПВА линейно возрастает с увеличением конверсии мономера, полидисперсность полимера достаточно узкая (1,2-1,3).

## Литература

- [1] Debuigne A., Poli R., Jérôme C., Jérôme R., Detrembleur C. // Progress in Polymer Science. 2009. V. 34. P. 211.

# РАДИКАЛЬНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ В ПРИСУТСТВИИ КИСЛОРОДА — НОВЫЙ ПЕРСПЕКТИВНЫЙ СПОСОБ СИНТЕЗА ВЫСОКОРАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИМЕРОВ

\* *Силантьев М.А., Курочкин С.А., Перепелицина Е.О.,  
Грачев В.П.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*silantievmihaill@mail.ru*

При радикальной полимеризации виниловых мономеров в присутствии кислорода протекают реакции передачи цепи с участием пероксильных и алкоксильных радикалов  $\sim\text{MOO}\cdot$  ( $\sim\text{MO}\cdot$ ) +  $\text{RH} \rightarrow \sim\text{MOOH}$  ( $\sim\text{MOH}$ ) +  $\text{R}\cdot$ , приводящие к уменьшению длины материальной цепи на 1 – 1.5 порядка по отношению к длине кинетической цепи. Такое уменьшение позволяет реализовать один из подходов к синтезу высококоразветвленных полимеров (ВРП) трехмерной радикальной полимеризацией, в котором используется недорогой и доступный реагент — кислород. Целью данного исследования является определение оптимальных условий для синтеза стабильного полимерного продукта с высоким содержанием высококоразветвленных макромолекул путем окислительной сополимеризации стирола (Ст) и дивинилбензола (ДВБ).

Полимеризацию в растворе (40% мас. мономеров) проводили при температуре 95°C при интенсивном перемешивании и непрерывном барботировании кислородсодержащим газом. В качестве инициатора использовали 2,2'-азо-бис-изобутиронитрил (АИБН).

Высокоразветвленные полимеры, полученные при высоких расходах кислорода (90 и 110 л/ч,  $[\text{АИБН}]_0 = 0.01$  моль/л), представляют собой мутные, высоковязкие жидкости ( $M_n \approx 500$ ,  $M_w \approx 10000$ ) с массовой долей кислорода ( $\omega_O$ ) около 22%. Такие полимеры разрушаются при комнатной температуре и по данным дифференциальной сканирующей калориметрии основной вклад в разрушение полимеров вносит большое количество пероксидных групп, содержащихся в основной цепи полимера. В условиях более низкого расхода кислорода (0.4 и 1.3 л/ч,  $[\text{АИБН}]_0 = 0.05$  моль/л) были получены стабильные бесцветные стеклообразные ВРП ( $M_n \approx 48000$ ,  $M_w \approx 573000$ ,  $\omega_O \approx 5\%$ ) с низким содержанием пероксидных групп. Молекулярно-массовое распределение полученных полимеров полимодально. В высокомолекулярной области можно выделить три моды с суммарной массовой долей 52%, которые соответствуют макромолекулам, состоящим из девяти и более первичных полимерных цепей.

# СОПОЛИМЕРИЗАЦИЯ ЭТИЛЕНА С ГЕКСЕНОМ-1 НА ИММОБИЛИЗОВАННЫХ МЕТАЛЛОЦЕНОВЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ

\* *Старчак Е.Е., Ушакова Т.М., Новокшинова Л.А.*

*ИХФ РАН, Москва, Россия*

*\*star2004i341@rambler.ru*

Цель работы заключалась в исследовании сополимеризации этилена с гексеном-1 на разработанных иммобилизованных катализаторах на основе соединений Zr и Hf различного дизайна для выяснения влияния природы металла, состава, строения металлоценового соединения и природы активатора на их каталитические свойства. Использовали металлоценовые соединения  $\text{Cp}_2\text{ZrCl}_2$  (**1**), *rac*- $\text{Me}_2\text{Si}(2\text{-Me-4-Ph-Ind})_2\text{ZrCl}_2$  (**2**) и *rac*- $\text{Me}_2\text{Si}(2\text{-Me-4-Ph-Ind})_2\text{HfCl}_2$  (**3**). В качестве активаторов применяли метил- и изобутил-алюмоксаны, синтезированные на поверхности монтмориллонита ММТ- $\text{H}_2\text{O}/\text{AlMe}_3(\text{Ali-Vu}_3)$  и для сравнения коммерческий метилалюмоксан (МАО). Кинетику полимеризации и активность катализаторов исследовали в широком интервале отношений концентраций сомономеров  $f = [\text{C}_6\text{H}_{12}]/[\text{C}_2\text{H}_4]$ . Проводили сравнение ММ и составов образующихся сополимеров этилен/гексен-1 (СЭГ). Показано, что в присутствии изученных катализаторов скорость сополимеризации растет во времени, достигает максимума  $R_{\text{max}}$  и далее уменьшается. Иммобилизованные цирконоценовые катализаторы ММТ- $\text{H}_2\text{O}/\text{AlR}_3/1$  (**2**) проявляют в сополимеризации высокую каталитическую активность, которая зависит от состава и строения металлоцена. Установлено влияние природы металла (Zr, Hf) в Мт-ценовом соединении на эффективность иммобилизованных катализаторов. Так, активность **3**, иммобилизованного на ММТ( $\text{H}_2\text{O}$ )/ $\text{AliVu}_3$ , намного превышала активность системы на основе цирконоцена **2**. Величина  $R_{\text{max}}$  при одинаковых условиях ( $f=5.3$ ) для ММТ( $\text{H}_2\text{O}$ )/ $\text{AliVu}_3/2$  и ММТ( $\text{H}_2\text{O}$ )/ $\text{AliVu}_3/3$  равнялась, соответственно, 5000 кгПЭ/мольZr[C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>]ч и 20600кгПЭ/мольHf[C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>]ч. Повышение температуры полимеризации на ММТ( $\text{H}_2\text{O}$ )/ $\text{AliVu}_3/3$  с 30 до 50<sup>0</sup>С привело к возрастанию величины  $R_{\text{max}}$  до 80000 кгПЭ/мольHf[C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>]ч. Иммобилизация **1**, **2** и **3** приводит к увеличению ММ и индекса полидисперсности сополимеров относительно СЭГ, синтезированных на соответствующих гомогенных системах. Сополимеризация на иммобилизованных катализаторах характеризуется образованием продукта с высоким содержанием сомономера. При использовании ММТ- $\text{H}_2\text{O}/\text{AlR}_3/\text{Mt}$ -цен катализаторов несколько повышается величина константы относительной реакционной способности сомономеров  $r_1$ .



## СОЗДАНИЕ НОВЫХ БИОРАЗЛАГАЕМЫХ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПЭНП И ПРИРОДНЫХ ДОБАВОК

<sup>\*1</sup> *Хватов А.В.*, <sup>2</sup> *Шушкина В.П.*, <sup>2</sup> *Габдуллина А.И.*,  
<sup>1</sup> *Луканина Ю.К.*, <sup>1</sup> *Колесникова Н.Н.*, <sup>1</sup> *Попов А.А.*  
<sup>1</sup> *ИБХФ РАН, Москва, Россия*, <sup>2</sup> *РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва,*  
*Россия*  
*\*hvatanatoliy@gmail.com*

Высокие темпы роста производства и потребления пластмасс, характерные для развитых в промышленном отношении стран, обусловили возникновение относительно новой проблемы: все возрастающее количество отходов, загрязняющих окружающую среду. Одним из направлений решения этой проблемы является создание биоразлагаемых композиционных полимерных материалов.

В работе были изучены композиционные материалы полиэтилена низкой плотности (ПЭНП) с природными добавками (ПД): целлюлоза, соевая мука, дробина. Содержание ПД в смесевых композициях составляло 5, 10, 15 масс.%. Было исследовано влияние факторов окружающей среды (вода, органические кислоты, почва) на изучаемые композиции. Изменения, происходящие в смесевых композициях после воздействия факторов окружающей среды, фиксировались методами ИК-Фурье спектроскопии и ДСК.

Исследование динамики водопоглощения изучаемых композиций позволило выявить основные факторы, способствующие росту сорбции воды: увеличение степени дисперсности и количества добавки. Наиболее высокие значения зафиксированы у композиций с соевой мукой. Изучение эффекта длительного воздействия водной среды показало, что вода оказывает пластифицирующее воздействие, что приводит к значительному увеличению (на 9%) степени кристалличности.

Для композиций, содержащих соевую муку и дробину, наблюдается уменьшение площади пиков в областях  $3580 - 3050 \text{ см}^{-1}$  и  $1760 - 1540 \text{ см}^{-1}$ , что может быть связано с процессом гидролиза добавок под действием кислот. На образцы с целлюлозой кислоты не оказывают существенного влияния.

На пленочные образцы ПЭНП воздействие почвы не оказывает значительного влияния. Для композиций, помещенных в почву, наблюдается увеличение степени кристалличности, что может быть связано с формированием более упорядоченной кристаллической структуры в результате длительного воздействия водной среды и почвы, приводящей к процессу перестройки менее упорядоченных областей ПЭНП.

## СРАВНЕНИЕ АДГЕЗИОННЫХ СВОЙСТВ АДДИТИВНЫХ И МЕТАТЕЗИСНЫХ ПОЛИНОРБОРНЕНОВ

<sup>\*2</sup>Цветкова Д.С., <sup>2</sup>Богданова Ю.Г., <sup>1</sup>Костина Ю.В.,  
<sup>1</sup>Грингольц М.Л., <sup>2</sup>Алентьев А.Ю., <sup>1</sup>Финкельштейн Е.Ш.  
<sup>1</sup>ИНХС РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва,  
Россия

\*d.s.tsvetkova@hotmail.com

Одним из перспективных направлений полимерного дизайна является создание термостойких полимеров, характеризующихся высокой адгезионной способностью по отношению к поверхностям различной природы. Удобными и коммерчески выгодными объектами для этих целей являются аддитивные (АПНБ) и метатезисные (МПНБ) полинорборнены (ПНБ) – продукты аддитивной и метатезисной полимеризации норборнена и его производных. Возможность практического использования полимеров во многом определяют энергетические характеристики их поверхностей при контакте с различными средами и закономерности изменения этих характеристик. Поэтому изучение закономерностей изменения этих характеристик при введении заместителей в мономерное звено полимеров, является важной задачей, решение которой позволит определить пути направленного модифицирования ПНБ для их использования в качестве адгезивов. В данной работе определены энергетические характеристики поверхностей ПНБ на границах с воздухом и жидкостями, моделирующими полярную и неполярную фазы (вода, октан). Объектами исследования были МПНБ и 2,3-АПНБ (незамещенные и содержащие одну SiMe<sub>3</sub>-группу в мономерном звене), а также незамещенный 2,7-АПНБ. Все полимеры были синтезированы и охарактеризованы в ИНХС им. А.В. Топчиева РАН. Установлено, что МПНБ являются более перспективными адгезивами для полимерных композиционных материалов и защитных покрытий, чем АПНБ. Введение объемного заместителя в мономерное звено МПНБ создает дополнительные возможности для тонкого варьирования их адгезионных свойств за счет регулирования процессов термоокислительной сшивки, характерных для МПНБ. Обнаружена корреляция между дисперсионной составляющей удельной свободной поверхностной энергии и свободным объемом всех исследованных полимеров. Этот результат чрезвычайно важен для прогноза использования полимеров в качестве мембранных материалов на основании энергетических характеристик их поверхностей и требует дальнейших исследований такой корреляции для других рядов родственных полимеров.

# НАНОКОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНА И НАНОПЛАСТИН ГРАФИТА: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА, СВОЙСТВА <sup>1</sup>

<sup>\*3</sup> *Юхаева Г.Р.*, <sup>3</sup> *Назирова О.Д.*, <sup>3</sup> *Бревнов П.Н.*,  
<sup>3</sup> *Гринев В.Г.*, <sup>3</sup> *Крашенинников В.Г.*, <sup>3</sup> *Новожионова Л.А.*,  
<sup>1</sup> *Чмутин И.А.*, <sup>2</sup> *Синевич Е.А.*

<sup>1</sup> *АНО нанотехнологии, Москва, Россия*, <sup>2</sup> *ИСПМ РАН, Москва, Россия*,  
<sup>3</sup> *ИХФ РАН, Москва, Россия*

*\*guzel327@gmail.com*

Для синтеза нанокomпозиционных материалов на основе полиэтилена и нанопластин графита (НГ) был применен метод полимеризационного наполнения (полимеризация *in situ*). Предложенный способ позволил синтезировать нанокomпозиты с равномерным распределением нанопластин в полимерной матрице, а также концентраты с высоким содержанием нанопластин графита для дальнейшего разбавления полимером.

Введение нанопластин графита в полиэтиленовую матрицу приводит к значительной модификации свойств материала уже при небольшом содержании наполнителя. Так, при содержании НГ всего около 2 - 3 об. % нанокomпозиты характеризуются в сравнении с ненаполненным полиэтиленом значительным повышением жесткости и деформационной теплостойкости, а также термостабильности и огнестойкости.

Перспективным направлением применения слоистых наноаппликателей является создание материалов с пониженной газопроницаемостью для использования в качестве пленочных и упаковочных материалов. Синтезированные нанокomпозиты характеризуются резким снижением газопроницаемости: при степени наполнения 3 об.% газопроницаемость снижается в 3, а при 7 об.% - более чем в 10 раз.

Исследование электропроводности полученных нанокomпозитов показало, что, в зависимости от структурной организации нанослоев графита в полимерной матрице, порог перколяции составляет около 3 % об. При этом достигается электропроводность порядка  $0,1 \text{ (Ом}\cdot\text{см)}^{-1}$ .

Синтезированные нанокomпозиты ПЭ-НГ обладают существенно более высокой диэлектрической проницаемостью по сравнению с материалами, наполненными сажей, графитом, шунгитом при одинаковых степенях наполнения. При этом высокая диэлектрическая проницаемость нанокomпозитов с НГ достигается при более низких диэлектрических потерях, что особенно важно для практического применения в качестве полупроводящих слоев в силовых кабелях.

---

<sup>1</sup>Работа выполняется при поддержке грантов ОХНМ РАН, ОФИ-м №09-03-12232, ФЦП-НОЦ (ГК № 02.740.11.0406).



**ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА  
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ И  
НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ**

# СИНТЕЗ И СВОЙСТВА КРАУНСОДЕРЖАЩИХ И МОДЕЛЬНЫХ ГЕТАРИЛФЕНИЛАЦЕТИЛЕНОВ И АЦЕТИЛЕНИЛЬНЫХ КРАСИТЕЛЕЙ

<sup>\*1</sup> Александрова Н.А., <sup>2</sup> Лобова Н.А., <sup>2</sup> Ведерников А.И.,  
<sup>2</sup> Громов С.П.

<sup>1</sup> МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия, <sup>2</sup> ЦФ РАН, Москва,  
Россия

\*11aha11@rambler.ru

Разработан новый метод синтеза краунсодержащих и модельных гетарилфенилацетиленов рядов пиридина, хинолина и бензотиазола, и ацетиленильных красителей на их основе из гетарилфенилэтиленов.

Изучено строение и комплексообразование полученных соединений методами рентгеноструктурного анализа и спектрофотометрического титрования.

Гетарилфенилацетилены могут быть использованы для синтеза новых ацетиленильных красителей, в качестве колориметрических и люминесцентных молекулярных сенсоров и при создании светочувствительных супрамолекулярных систем [1].

## Литература

- [1] Ведерников А.И., Лобова Н.А., Кузьмина Л.Г., Александрова Н.А., Сазонов С.К., Ховард Дж.А.К., Громов С. П. // Известия академии наук. Серия химическая., послана в печать.

## ТУННЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ГЕТЕРОПОЛИСОЕДИНЕНИЙ

\* Буданов Б.А., Далидчик Ф.И., Ковалевский С.А.

*ИХФ РАН, Москва, Россия*

*\* budanov.b@gmail.com*

Гетерополисоединения (ГПС) в последнее десятилетие активно изучаются как новые перспективные наноматериалы. Значительная роль, которая отводится ГПС в науке, технике и медицине, диктует необходимость их изучения на современном «одномолекулярном» уровне. Сегодня этот уровень доступен только зондовыми методами, прежде всего сканирующей туннельной микроскопии.

В высоковакуумных экспериментах ( $P < 10^{-9}$  торр) при измерении туннельных спектров молекул фосфорномолибденовой кислоты — «классического» гетерополисоединения с анионом Кеггина ( $\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$ ) нами были обнаружены спектры, содержащие участки вольт-амперных зависимостей, на которых с ростом напряжения,  $U$ , ток,  $J$ , уменьшается (т.н. участки отрицательного дифференциального сопротивления, ОДС). Наблюдались примеры спектров, содержащие одиночные резонансные максимумы с аномально высокими (для комнатных температур) отношениями резонансных,  $J_r$ , и фоновых,  $J_f$ , токов (до 10 и более). Одновременно с этим были найдены примеры спектров с парными, симметрично расположенными относительно точки  $U = 0$  максимумами со столь же большими значениями  $K = \frac{J_r}{J_f}$ .

По совокупности измеренных туннельных спектров выяснены основные свойства ОДС туннельных наноконтактов с анионами Кеггина. Установлено, что в этих структурах резонансные особенности типа ОДС чаще всего наблюдаются симметрично расположенными парами (с различными ширинами и значениями параметра  $K$ ); во многих случаях форма особенностей близка к лоренцовским пикам; их положение (по оси  $U$ ) и отношения резонансных,  $J_r$ , и фоновых токов,  $J_f$ , зависят от величины вакуумного зазора,  $z$ , ( $\frac{dK}{dz} > 0$ ).

Предложена новая модель формирования ОДС в туннельных наноконтактах, содержащих большие молекулы со слабыми внутримолекулярными связями. Модель учитывает действие сильных электрических полей ( $F \sim 10^7 \text{ В/см}$ ), достаточных для проявления эффекта Ванье-Штарка, и позволяет объяснить всю совокупность экспериментальных фактов, известную для ГПС.

# СОРБЕНТЫ НА ОСНОВЕ СИЛИКАГЕЛЕЙ, ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНО МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПОЛИГЕКСАМЕТИЛЕНГУАНИДИНОМ И ПРОИЗВОДНЫМИ ХРОМОТРОПОВОЙ КИСЛОТЫ, ДЛЯ КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЦВЕТНЫХ И РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

*\*<sup>2</sup>Буйко О.В., <sup>1</sup>Лосев В.Н.*

*<sup>1</sup>ГУ НИИЦ «Кристалл», Красноярск, Россия, <sup>2</sup>СФУ, Красноярск,  
Россия*

*\*bujko\_olga@mail.ru*

Для концентрирования и определения микроколичеств элементов широко используются силикагели, модифицированные комплексообразующими реагентами. Наиболее распространены два основных приема модифицирования: химический и нековалентный. Нековалентная иммобилизация, сохраняя преимущества ковалентно модифицированных матриц, отличается от них простотой синтеза.

Предложен способ получения сорбентов на основе силикагелей, заключающийся в последовательном модифицировании их поверхности полигексаметиленгуанидином и производными хромотроповой кислоты (арсеназо I, арсеназо III и сульфеназо III). В процессе последовательной обработки на поверхности силикагелей образуется супрамолекулярный ансамбль из трех реагентов.

Максимальная поверхностная концентрация реагентов составляет 20 мкмоль/г для арсеназо I и 9 мкмоль/г для арсеназо III и сульфеназо III. Близкие поверхностные концентрации арсеназо III и сульфеназо III связаны со схожестью их строения и количеством сульфогрупп.

Поверхностные слои органических соединений устойчивы в слабых кислых растворах до 1 М HCl и в растворах с высокой ионной силой - до 10 г/л по NaCl. Силикагель, модифицированный арсеназо I, использован для концентрирования и сорбционно-атомно-эмиссионного определения цветных, тяжелых и редкоземельных металлов. Максимальная степень извлечения Fe(III) и Bi(III) находится в диапазоне pH 3–6; Al(III) и Cu(II) – pH 4–6; Ni(II), Cd(II), Pb(II) – pH 5–6. Редкоземельные металлы максимально сорбируются на поверхности модифицированного кремнезема при pH 5–7. Сорбционные емкости по Cu(II), Ni(II) и Al(III), определенные из горизонтальных участков изотерм сорбции, составляют 0,02 ммоль/г.

Сорбент, модифицированный арсеназо III, использован при концентрировании и определении Ca(II) и Mg(II). Максимальная степень извлечения металлов достигается в диапазоне pH 4–7. Сорбционные емкости для данных металлов составляют 0,009 ммоль/г.



# МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ПОЛИМЕРНЫЕ ПОКРЫТИЯ НА МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦАХ. ПРОБЛЕМЫ И РЕШЕНИЯ

*\*Бычкова А.В., Сорокина О.Н., Коварский А.Л.,  
Леонова В.Б., Розенфельд М.А., Шапиро А.Б.*

*ИБХФ РАН, Москва, Россия*

*\*annb0005@yandex.ru*

Целью настоящей работы является создание устойчивых дисперсий магнитных наночастиц с многофункциональными покрытиями, позволяющими осуществлять химическую прививку биологически активных веществ и лекарств к частицам. Методы исследования: электронный магнитный резонанс [1], упругое и динамическое светорассеяние, атомно-силовая микроскопия. В качестве магнитного сорбента использовали однодоменные частицы магнетита ( $d_{av}$  11 нм) в виде гидрозоля.

Адсорбция на наночастицах (НЧ) фибриногена (ключевого белка системы свертывания крови) сопровождается образованием крупных кластеров, может вызывать тромбообразование и объясняет необходимость модификации поверхности НЧ. Кроме того, фибриноген вытесняет макромолекулы других веществ (альбумина, гепарина) с поверхности НЧ. Следовательно, пришивка покрытий к поверхности НЧ или ковалентная сшивка покрытий обязательна.

В качестве полимера для покрытий был выбран синтетический нетоксичный полиэтиленимин (ПЭИ). Каждое звено ПЭИ содержит реакционноспособную аминогруппу, позволяющую образовывать связи с функциональными группами белков и лекарственных препаратов и модифицировать ПЭИ. В исследуемом диапазоне концентраций (0.5-5.0 мг/мл) ПЭИ адсорбируется на НЧ с образованием кластеров с размерами  $> 1$  мкм. Уменьшить размеры кластеров можно ультразвуковым диспергированием системы, снижением (до 0.02 мг/мл) или увеличением (до 50 мг/мл) концентрации ПЭИ в растворе, модификацией полимера (например, окисью пропилена). Однако, большое количество НЧ в составе кластеров улучшает их магнитоуправляемость. Ведутся исследования по закреплению покрытия на наночастицах.

В работе рассмотрены основные принципы создания биосовместимых многофункциональных покрытий на магнитных наночастицах.

## Литература

- [1] Bychkova A.V., Sorokina O.N., Shapiro A.B., Tikhonov A.P., Kovarski A.L. The Open Colloid Science Journal. 2009. V.2. P.15-19.

# ПОЛУЧЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ ДЛЯ КОНСТРУИРОВАНИЯ КВАНТОВЫХ ДОТОВ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ<sup>1</sup>

*\*Гордосевич К.М., Тихонов А.П., Попова Г.В.*

*РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

*\*tikhon@muctr.ru, galina@muctr.ru*

В последние годы интенсивно ведутся исследования по созданию квантовых структур и материалов на их основе. Объектами выбора чаще всего являются соединения с перестраиваемой люминесценцией. Нами отработаны методики получения наночастиц ряда металлов с размерами, соответствующими максимальному проявлению их поверхностных свойств. В настоящем сообщении приводятся данные по получению наноразмерных частиц европия, характеризующихся минимальным их распределением по размерам. Распределение наночастиц европия по размерам в растворе определяли методом динамического рассеяния света (длина волны излучения 633 нм). Программное обеспечение (Dispersion Technology Software, Malvern) позволяет устанавливать средний размер наночастиц, исходя из распределения интенсивности светорассеяния, объемного содержания и числа частиц. Наночастицы европия представляют интерес для изучения сверхтонких пленок модельных биополимеров, в данном случае, циклоолиготриптофана, содержащего домены, способных к свечению, эмиссии заряженных частиц при облучении или же наноразмерных кристаллов, связанных с низкомолекулярным биоконъюгатом- 5-метокситриптамином. Предварительно были синтезированы указанные биофрагменты и проведено их модельное комплексообразование с солями европия. Показано, что самособирающийся ансамбль из 4-х молекул циклопентамера, содержащий европий, люминесцирует в мультислойной пленке только после гамма-облучения. При этом интенсивность свечения зависит от концентрации европия в образцах. В настоящее время нами разрабатываются пути синтеза конъюгатных систем с наночастицами европия и оксида европия для изучения их поведения в условиях радиоактивного облучения.

## Литература

- [1] Попова Г.В., Матвеева Н.К. // Оборонный комплекс – научно-техническому прогрессу России, 2010. № 2. С. 18.

---

<sup>1</sup>Работа выполняется при финансовой поддержке Минобрнауки РФ, АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы», Проект №2.1.1.325/11158, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России», Госконтракт №02.740.11.0142.

## ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ПРОИЗВОДНЫХ СПИРОПИРАНОВ<sup>1</sup>

<sup>\*3</sup> *Звездин К.В.*, <sup>3</sup> *Лаптев А.В.*, <sup>3</sup> *Беликов Н.Е.*,  
<sup>3</sup> *Лукин А.Ю.*, <sup>1</sup> *Демина О.В.*, <sup>3</sup> *Швец В.И.*, <sup>2</sup> *Бричкин С.Б.*,  
<sup>2</sup> *Николенко Д.Ю.*, <sup>3</sup> *Ходонов А.А.*

<sup>1</sup> *ИБХФ РАН, Москва, Россия*, <sup>2</sup> *ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*,

<sup>3</sup> *МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*\*kzvezdin@yahoo.com*

Особый интерес представляют метки и маркеры на основе фотохромных соединений, позволяющие управлять свойствами модифицируемого объекта с использованием света с разной длиной волны. Нами был разработан ряд оригинальных способов модификации производных фотохромных 6'-нитроспиропиранов введением спейсеров различной природы по С5-положению индолинового фрагмента молекулы. В результате были получены фотохромные производные витамина А ретиналя, фотохромные изоксазолы и изоксазолины, а также фотохромные лиганды, содержащие различные линкеры с реакционноспособной терминальной тиольной группой. Нами были исследованы спектрально-кинетические свойства производных спиропиранов, а также конъюгатов меркаптосодержащих спиропиранов с квантовыми точками CdSe.

---

<sup>1</sup>Работа была выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ, гранта президента РФ для поддержки молодых кандидатов наук и государственного контракта ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России 2009-2013».

# ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СТРУКТУРА НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ЗОЛОТА И НИКЕЛЯ, ОСАЖДЕННЫХ НА ПОВЕРХНОСТЬ ГРАФИТА МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОГО ДИСПЕРГИРОВАНИЯ<sup>1</sup>

*\* Кирсанкин А.А., Гришин М.В., Шуб Б.Р.*

*ИХФ РАН, Москва, Россия*

*\*kirsankin@mail.ru*

Известно что, каталитическая активность структуры состоящей из кластеров наночастиц на основе золота и никеля на примере реакции гидрогенизации хлоруглеводородов превосходит активность изолированных частиц на несколько порядков. В нашей работе методами сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и Оже-спектроскопии были определены физические свойства таких структур, в частности, были получены: распределения наночастиц и их кластеров на поверхности графита (0001), размеры изолированных частиц и их электронное строение (проводимость) в условиях сверхвысокого вакуума.

Полученные с помощью сканирующего туннельного микроскопа топографические измерения показали, что в зависимости от условий нанесения методом лазерного электродиспергирования (LED) наночастицы могли формировать как сплошное покрытие на поверхности графита, так и изолированные кластеры, состоящие из нескольких наночастиц. Характерные диаметры наночастиц на основе золота составляют 2-3 нанометра, в то время как диаметры наночастиц на основе никеля колеблются в пределах от 2 до 20 нанометров.

Методами сканирующей туннельной спектроскопии и Оже-спектроскопии был проанализирован состав и измерена проводимость наночастиц на основе золота и никеля. По Оже-спектрам было установлено, что наночастицы на основе золота не содержат примесей кислорода и углерода. Измерения туннельных спектров показали, что проводимость таких наночастиц превосходит проводимость эталонного объекта — графита. Наночастицы на основе никеля, в свою очередь, содержат значительную примесь углерода. Проводимость таких наночастиц, как правило, значительно меньше, чем проводимость графита. Во многих случаях на вольт-амперных зависимостях как для наночастиц на основе золота, так и на основе никеля была обнаружена запрещенная зона, ширина которой характерна для оксида с недостатком атомов кислорода.

Авторы выражают благодарность Т.Ростовщиковой, С.Николаеву (МГУ им.М.В.Ломоносова), С.Гуревичу, В.Кожевину, Д.Явсину (ЛФТИ им. А.Ф.Иоффе) за предоставленные образцы.

---

<sup>1</sup>Работа поддержана РФФИ, гранты №№ 10-03-00602 и 11-03-00342.

## ВОДНЫЕ И ВОДНО-ОРГАНИЧЕСКИЕ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ НЕИОННОГО ПАВ BRIJ-35

*\*Кудряшова Ю.Р., Ибрагимова А.Р., Захарова Л.Я.*

*ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань, Россия*

*\*ablakova\_yuliana@iopcr.u*

Одной из проблем современной химии является поиск эффективных и селективных каталитических систем с регулируемой активностью. Перспективным направлением в этой области является создание супрамолекулярных систем и использование их в качестве нанореакторов для различных органических реакций. Нами изучены супрамолекулярные системы на основе неионного ПАВ (НПАВ) Brij-35 в воде и в среде вода–ДМФА. Комплексом методов (тензиометрия, вискозиметрия и динамическое светорассеяние) определена критическая концентрации мицеллообразования (ККМ), а также измерены размеры образующихся агрегатов. Выявлено влияние апротонного растворителя на самоорганизацию НПАВ. Показано, что добавка 10% об. ДМФА к водной системе Brij-35 приводит к возрастанию вязкости раствора и увеличению ККМ более чем на порядок: с 0.074 мМ до 0.9 мМ. Вероятно, добавка апротонного растворителя нарушает структуру воды и приводит к ослаблению гидрофобного эффекта, контролирующего агрегацию ПАВ.

Полученные супрамолекулярные системы исследованы в качестве нанореакторов в реакциях гидролитического расщепления эфиров кислот тетракоординированного фосфора. Кинетические данные получены методом спектрофотометрии и проанализированы в рамках псевдофазной модели мицеллярного катализа. Установлено, что водные системы Brij-35 ингибируют реакции щелочного гидролиза эфиров фосфоновых кислот до трех раз. При определенной концентрации НПАВ происходит практически полное прекращение реакции. Измерение микрополярности в поверхностном слое мицелл с помощью сольватохромного зонда E(t)-30 показало, что с увеличением концентрации ПАВ наблюдается снижение величины E(t), однако, полярность микроокружения в поверхностном слое сохраняется на уровне спиртов. При спектральном исследовании п-нитрофенола обнаружено снижение оптической плотности раствора при длине волны 400 нм по мере увеличения концентрации Brij-35. Это позволяет предположить, что причиной ингибирования и прекращения процесса является перемещение зоны реакции из поверхностного слоя в менее полярное окружение в ядре мицеллы.

# ВЛИЯНИЕ БИОГЕННЫХ ФОТОХРОМНЫХ АКЦЕПТОРОВ ЭЛЕКТРОНА НА ФЛУОРЕСЦЕНЦИЮ ХЛОРОФИЛЛА<sup>1</sup>

<sup>\*2</sup> Лобанов А.В., <sup>1</sup> Клименко И.В., <sup>2</sup> Неврова О.В.,  
<sup>1</sup> Журавлева Т.С.

<sup>1</sup> ИБХФ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup> ИХФ РАН, Москва, Россия

\*avlobanov@mail.ru

Взаимодействие природных и синтетических порфиринов с биологически активными соединениями, включающее перенос электрона, энергии и в ряде случаев стадии надмолекулярной самоорганизации, играет важную роль в фотобиологических и фотомедицинских процессах. В настоящей работе рассмотрено взаимодействие хлорофилла (Хл) с фоточувствительными акцепторами электрона, – 2-метил-1,4-нафтохиноном (МНХ) и никотинамидадениндинуклеотидфосфатом (НАДФ) с использованием спектральных методов.

В системе Хл-МНХ ( $[Хл] = 10 \text{ мкМ}$ ,  $[МНХ] = 10 \text{ мкМ} - 10 \text{ мМ}$ , этанол) интенсивность флуоресценции Хл снижается с увеличением концентрации МНХ, что указывает на быстрый перенос электрона от Хл к МНХ. В случаях, когда  $[МНХ] > 10 \text{ мМ}$ , напротив, происходит усиление флуоресценции Хл (при возбуждении на 430 нм) вследствие индуктивно-резонансного переноса энергии от МНХ к Хл, поскольку спектр излучения МНХ и спектр поглощения Хл перекрываются. Поскольку электронный спектр бинарной смеси является суперпозицией спектров Хл и МНХ, а тушение и возгорание флуоресценции Хл описываются линейными участками в координатах Штерна-Фольмера, процессы переноса электрона и энергии возбуждения имеют динамический тип, и комплексообразования Хл-МНХ не происходит. В системе Хл-НАДФ ( $[Хл] = 10 \text{ мкМ}$ ,  $[НАДФ] = 1 - 100 \text{ мкМ}$ , этанол/вода) также наблюдается фоторазделение зарядов, приводящее к динамическому тушению флуоресценции Хл. При  $[НАДФ] > 100 \text{ мкМ}$  наблюдается существенная трансформация спектров поглощения и флуоресценции Хл, свидетельствующая о координационном взаимодействии Хл и НАДФ. Зависимость Штерна-Фольмера в этом диапазоне не линейна из-за вклада статического типа тушения. Отметим, что в присутствии МНХ и НАДФ методом ЭПР при 77 К регистрируются сигналы катион-радикала хлорофилла и продукты захвата электрона.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансировании грантом Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук МК-227.2011.3, программыми Президиума РАН № 3 и № 25, Ведущей научной школой (грант НШ-65059.2010.3).

## ФОРМИРОВАНИЕ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ АНСАМБЛЕЙ НА ПОВЕРХНОСТИ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ОКСИДОВ

*\*Метелица С.И., Лосев В.Н., Дидух С.Л.*

*ГУ НИИЦ «Кристалл», Красноярск, Россия*

*\*metelitsa\_sl@mail.ru*

Закрепление сульфосодержащих органических реагентов на оксидных поверхностях в водных растворах затруднено вследствие взаимного электростатического отталкивания отрицательно заряженных сульфогрупп реагента и силанольных групп поверхности. Для устранения этого затруднения использован прием обработки поверхности неорганических оксидов высокоосновными полиаминами (ПА).

Методом капиллярного электрофореза на примере полигексаметиленгуанидина гидрохлорида показано, что наиболее эффективно на поверхности оксидов закрепляются олигомеры с наибольшей молекулярной массой. Поверхностная концентрация ПА зависит от ряда параметров матрицы и природы и строения ПА. Устойчивость слоя ПА сохраняется в диапазоне 4 М HCl - pH 9.

Слой ПА на поверхности оксидов способен к взаимодействию с сульфогруппами молекул органических реагентов, благодаря чему на поверхности оксида формируется супрамолекулярный ансамбль органических соединений, удерживающийся посредством нековалентных связей. Максимальная поверхностная концентрация закрепляемого реагента зависит от природы и строения реагента, поверхностной концентрации ПА, характеристик матрицы – неорганического оксида и составляет порядка 0.5 – 25 мкмоль/г. На примере нитрозо-R-соли и нитрозо-H-соли показано, что поверхностная концентрация реагента возрастает с уменьшением количества сульфогрупп в его молекуле.

Наибольшая поверхностная концентрация нитрозо-R-соли наблюдается для силикагеля со средним диаметром пор 60 Å. Увеличение среднего диаметра пор (до 100 Å), равно как и уменьшение до 40 Å приводит к снижению поверхностной концентрации реагента. Существенное влияние на устойчивость поверхностного ансамбля оказывают присутствующие в растворе электролиты. Сульфаты при концентрации 200 ммоль/л препятствуют закреплению ПА на поверхности оксидов. Фосфатный буферный раствор позволяет в 5–10 раз увеличить поверхностную концентрацию реагента и одновременно увеличить эффективность его закрепления. Неорганические оксиды с супрамолекулярными слоями на их поверхности использованы для сорбционного концентрирования ионов металлов.

# НОВЫЕ ЦИАНИНОВЫЕ КРАСИТЕЛИ И СВЕТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СИСТЕМЫ НА ИХ ОСНОВЕ <sup>1</sup>

<sup>\*2</sup> Никифоров А.С., <sup>2</sup> Фомина М.В., <sup>2</sup> Ведерников А.И.,  
<sup>1</sup> Кузьмина Л.Г., <sup>2</sup> Громов С.П.

<sup>1</sup> ИОНХ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup> ЦФ РАН, Москва, Россия

<sup>\*</sup>2post@inbox.ru

Создание светочувствительных супрамолекулярных систем, способных к фотоиндуцированному переносу энергии и электрона, представляет значительный интерес для органической нанофотоники.

Нами синтезированы новые симметричные моно-, три-, и пентаметиновые цианиновые красители ряда бензотиазола и индоленина, содержащие аммонииоалкильные заместители у атомов азота.

Строение полученных соединений было доказано с помощью ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C, ИК-, электронной спектроскопии, рентгеноструктурного анализа и подтверждено данными элементного анализа.

Изучено образование супрамолекулярных комплексов полученных красителей с бискраунстильбенами и кукурбитурилами в органических и водных растворах. Константы устойчивости образующихся комплексов и их стехиометрия определены методом ЯМР <sup>1</sup>H-титрования.

Синтезированные цианиновые красители и супрамолекулярные системы на их основе перспективны в качестве оптических сенсоров, компонентов светочувствительных молекулярных устройств и машин.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Президиума РАН.



# КОСВЕННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ПРИМЕСНОМ БИСЛОЕ ГРАФЕНА <sup>1</sup>

<sup>\*2</sup>*Пак А.В.*, <sup>1</sup>*Белоненко М.Б.*, <sup>2</sup>*Лебедев Н.Г.*

<sup>1</sup>*ВИБ, Волгоград, Россия*, <sup>2</sup>*ВолГУ, Волгоград, Россия*

*\*pak.anastasia@gmail.com*

В данной работе в рамках s-d модели исследовались особенности косвенного РККИ-взаимодействия в примесном биграфене. В качестве примеси использовался атомарный водород. Расчеты показали, что на малых расстояниях предпочтительным является антиферромагнитное упорядочивание спинов примесей, а с увеличением расстояния упорядочивание становится ферромагнитным. Показаны зависимости коэффициента обменного взаимодействия от параметров задачи.

Увеличение напряженности электрического поля приводит к сильно осциллирующей зависимости косвенного взаимодействия спинов примесей от расстояния, что может быть связано с резонансными переходами электронов между расщепленными уровнями. Увеличение внешнего магнитного поля также приводит к неоднородному распределению примесных спинов, фактически наблюдается образование доменных структур, чередование областей ферромагнитной и антиферромагнитной упорядоченности.

Особенность РККИ - взаимодействия примесных атомов на поверхности биграфена, исследуемого в данной работе, заключается в том, что было рассмотрено обменное взаимодействие, на основании полного (включая и коротковолновую часть) спектра электронов кристаллической решетки. Данное дисперсионное соотношение включает импульсы электронов во всей зоне Бриллюэна.

## Литература

- [1] Henwood D., Carey D. // Physical Review B. 2007. V. 75. P. 245413.
- [2] Уайт Р. //Квантовая теория магнетизма. М.: Мир. 1985. 304 с.
- [3] Изюмов Ю.А., Кацнельсон М.И., Скрыбин Ю.Н. //Магнетизм коллективизированных электронов. М.: Физматлит. 1994. 368 с.
- [4] Маделунг О. Теория твердого тела. М.: Наука. 1980. 416 с.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы (проект № НК-16(3)).

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ МУЛЬТИСЛОЕВ НЕКОТОРЫХ ГЕТЕРОЦЕПНЫХ ПОЛИМЕРОВ МЕТОДОМ АСМ<sup>1</sup>

<sup>\*2</sup>Паладичева А.В., <sup>2</sup>Ванцян М.А., <sup>1</sup>Шуленина А.В.,  
<sup>1</sup>Беседин С.П.

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия, <sup>2</sup>РХТУ им.  
Д.И. Менделеева, Москва, Россия  
\*galina@muctr.ru, pallada-dancer@mail.ru

В настоящем сообщении мы рассматриваем мультислойные молекулярные пленки, полученные методом Ленгмюра-Шефера (ЛШ). В качестве полимерных объектов были взяты полиаминокислотные (ПАК) производные циклотрифосфазена (ЦТФ) и сополимеры 3,6-дигидрокси-пиридазина и изофталевой кислоты (поли-3,6-дигидрокси-пиридазилизофталат, ПДИ) в виде солей со стеариновой кислотой. Характер изотерм поверхностного давления позволяет заключить, что данные полимеры проявляют склонность к агрегации в монослой. Мультислойные пленки, содержащие до 40 монослоев (ПАК-производные ЦТФ) и до 65 монослоев (ПДИ) получали путем переноса монослоев с водной субфазы на твердую подложку (кварц). Метод АСМ показал, что пленки ПАК-производных ЦТФ имеют гранулированную поверхность с латеральным размером гранул 100 нм и средней высотой 7-8 нм. Шероховатость пленок составляет 1,4-1,8 нм. Пленки ПДИ также обладают гранулированной поверхностью, латеральный размер гранул- 50-200 нм, средняя высота 7-8 нм. Шероховатость пленок 3-4 нм. Методом АСМ также определена толщина мультислойных пленок. Для этого в контактном режиме с определенного участка образца снимали часть пленки до практически чистой поверхности подложки, после чего в полуконтактном режиме измеряли профиль сечения образца. Установлено, что в случае ПАК-производных ЦТФ толщина одного монослоя составляет примерно 2 нм, для ПДИ 0,5-1 нм.

## Литература

1. Ванцян М.А., Бобров М.Ф., Попова Г.В., Киреев В.В., Цирельсон В.Г. // ВМС, А. 2007. Т. 49. С. 533.
2. Ванцян М.А., Попова Г.В., Карпузова Е.А., Бобров М.Ф. // Нанотехника. 2010. С. 28.

---

<sup>1</sup>Работа выполняется при финансовой поддержке Минобрнауки РФ, АВИЦ «Развитие научного потенциала высшей школы», Проект №2.1.1.345/11095, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России», Госконтракт №02.740.11.0142.

# МИЦЕЛЛООБРАЗОВАНИЕ И КАТАЛИЗ В СИСТЕМЕ 1-ГЕКСАДЕЦИЛ-1-АЗОНИАБИЦИКЛО[2.2.2]ОКТАН БРОМИДА<sup>1</sup>

*\* Паширова Т.Н., Кашапов Р.Р., Жильцова Е.П.,  
Лукашенко С.С., Захарова Л.Я., Коновалов А.И.  
ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань, Россия  
\*pashirova@iopc.ru*

Катионные поверхностно-активные вещества (КПАВ), способные в растворе образовывать наноразмерные ансамбли, широко востребованы в практике. Ранее в наших работах было показано, что КПАВ на основе 1,4-диазабцикло[2.2.2]октана обладают рядом важных и интересных свойств [1, 2]. Объектом настоящего исследования является ближайший аналог таких КПАВ - кватернизованный гексадецилбромидом 1-азабцикло[2.2.2]октан (хинуклидин) (I). Известно, что хинуклидин является структурным фрагментом природных физиологически активных веществ (хинин) и различных синтетических лекарственных средств (адеклидин, оксидин, фенкарол). В связи с этим изучение свойств его производных является весьма актуальной задачей.

Комплексом методов (тензиометрия, кондуктометрия, динамическое рассеяние света) исследованы мицеллообразующие свойства соединения I в водных растворах. Установлено, что критическая концентрация мицеллообразования для I составляет  $0.4 \text{ ммоль} \cdot \text{л}^{-1}$  при  $40^\circ\text{C}$ .

Методом спектрофотометрии была изучена кинетика гидролиза 4-нитрофенилбутилхлорметилфосфоната (НБХФ) в присутствии I и 4-аза-1-гексадецил-1-азониабцикло[2.2.2]октан бромида (II). Расчет параметров реакции, согласно псевдофазной модели мицеллярного катализа показал, что ускорение реакции в присутствии I составляет 70 раз, а присутствии II – 64 раза. Каталитический эффект обусловлен концентрированием реагентов (субстрата и нуклеофила): константа связывания НБХФ с агрегатами I составляет  $6600 \text{ л} \cdot \text{моль}^{-1}$ , а II –  $2800 \text{ л} \cdot \text{моль}^{-1}$ .

## Литература

- [1] Паширова Т.Н. и др. // Изв. АН. Сер. хим. 2010. №9. С. 1699.
- [2] Гайсин Н.К. и др. // Коллоидный журнал. 2010. Т.72. №6 С. 755.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 09-03-00572-а.

# БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫЙ ПЕРЕНОС ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОННОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ В ПАРАХ ЦИАНИНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ В ПРИСУТСТВИИ ДНК<sup>1</sup>

*\*Пронкин П.Г., Татиколов А.С., Шведова Л.А.,  
Сультимова Н.Б.*

*ИБХФ РАН, Москва, Россия*

*\*pronkinp@gmail.com*

Представлены результаты исследования безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения (БПЭ) между молекулами катионных цианиновых красителей, образующих комплекс с ДНК, с измерением кинетики затухания флуоресценции.

В качестве доноров электронной энергии были выбраны оксакарбоцианиновые красители 3,3'-диметил-9-этилоксакарбоцианиниодид (Д1), 3,3',9-триэтил-6,6'-диметоксикарбоцианиниодид (Д2), 3,3',9-триэтил-5,5'-диметилксакарбоцианиниодид (Д3), в роли красителя-акцептора был выбран 3,3'-диэтилтиакарбоцианиниодид (А).

В присутствии ДНК (5.0 – 125.0 мкМ в.р.) наблюдается перенос энергии электронного возбуждения в парах донор-акцептор. Увеличение концентрации ДНК приводит к понижению значений эффективности ПЭ: для Д1 г уменьшается от 0.59 до 0.36 (при росте концентрации ДНК с 5.0 до 125.0 мкМ), в случае пары красителей Д3–А величина г уменьшается с 0.49 до 0.42 (при увеличении содержания биополимера в растворе с 6.25 до 50.0 мкМ). Эффекты БПЭ объясняются концентрированием молекул красителей (донора и акцептора) в окрестностях молекулы ДНК (в так называемой псевдофазе или микрофазе ДНК), расстояния (R) между донором и акцептором в системе составляют 35–50 ангстрем.

В работе изучено тушение флуоресценции доноров акцептором в широком диапазоне концентраций ДНК (4.97 – 248.0 мкМ). Тушение флуоресценции осуществляется главным образом по статическому механизму, что вызывает отклонение вверх и вогнутость экспериментальных зависимостей Штерна-Фольмера.

Авторы выражают благодарность проф. Б.И. Шапиро (ИЦ НИИ-ХИМФОТОПРОЕКТ) за предоставление полиметиновых красителей, а также В.Ю. Гаку (Институт проблем химической физики РАН) за помощь в проведении измерений кинетики флуоресценции.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ), проект № 10-03-00647.

# ДИМЕРИЗАЦИЯ И АВТОФОТОЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЕ АММОНИОАЛКИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ КРАУНСОДЕРЖАЩИХ СТИРИЛОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ<sup>1</sup>

<sup>\*2</sup> *Савин И.В.*, <sup>3</sup> *Лобова Н.А.*, <sup>3</sup> *Дмитриева С.Н.*,  
<sup>3</sup> *Ведерников А.И.*, <sup>1</sup> *Ушаков Е.Н.*, <sup>3</sup> *Громов С.П.*  
<sup>1</sup> *ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*, <sup>2</sup> *МФТИ (ГУ), Долгопрудный,*  
*Россия*, <sup>3</sup> *ЦФ РАН, Москва, Россия*  
*\*ivan.savin@phystech.edu*

Синтезирована большая серия аммониаalkильных производных краунсодержащих стироловых красителей (АКСК), в которой варьировались строение краун-эфирного фрагмента, природа гетероциклического остатка и длина аммониаalkильной цепочки.

Установлено, что молекулы АКСК в растворе способны образовывать псевдоциклические димеры благодаря дитопному взаимодействию макроцикл-катион аммония. С использованием методов глобального анализа спектральных данных определены спектры поглощения димеров и мономеров, а также константы равновесия димеризации в ацетонитриле и водно-ацетонитрильной смеси при фиксированной ионной силе раствора. Согласно полученным данным наиболее сильное влияние на величину константы равновесия димеризации оказывает строение краун-эфирного фрагмента.

Самосборка молекул АКСК в димеры дает возможность осуществить стереоспецифическую реакцию [2+2]-автофотоциклоприсоединения. Установлено, что квантовый выход этой реакции зависит от электронодонорных свойств краун-эфирного фрагмента.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке Российской академии наук и Российского фонда фундаментальных исследований.

# СПЕКТРАЛЬНО-ФЛЮОРЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА И УСТОЙЧИВОСТЬ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ ВКЛЮЧЕНИЯ ТАУТОМЕРОВ 5-ФТОРУРАЦИЛА С $\beta$ -ЦИКЛОДЕКСТРИНОМ<sup>1</sup>

<sup>\*2</sup> *Султанбаев М.В., <sup>2</sup> Остахов С.С., <sup>2</sup> Хурсан С.Л.,*

<sup>1</sup> *Ганцев Ш.Х., <sup>2</sup> Ахмадеева Г.Х.*

<sup>1</sup> *ГОУ ВПО БГМУ, Уфа, Россия, <sup>2</sup> ИОХ УНЦ РАН, Уфа, Россия*

*\*chemlum@anrb.ru*

Последовательность пиримидиновых оснований в полинуклеотидной цепи определяет генетическую информацию ДНК и матричных РНК. Большое внимание уделялось исследованию кето-енольной таутомерии производных урацила, в том числе их природного аналога – тимина, которая оказывает влияние на репродукцию и мутагенез ДНК. Целью настоящей работы являлось изучение спектральных свойств, кето-енольной таутомерии, состава и устойчивости супрамолекулярных комплексов включения по типу “гость-хозяин” 5-фторурацила (**FU**) с  $\beta$ -циклодекстрином (**CD**). Исследованы спектры флюоресценции (**FL**) таутомеров FU в нейтральных водных растворах в зависимости от содержания  $\beta$ -циклодекстрина. Установлено, что FU образует с CD флюоресцирующие супрамолекулярные комплексы включения эквимольного состава устойчивость которых понижается в ряду: 2,4-диоксо (**A**), 2-гидрокси-4-оксо (**B**), 4-гидрокси-2-оксо (**C**) и 2,4-дигидрокси (**D**). Из графического решения модифицированного уравнения Кетелара определена константа равновесия комплексообразования дикето-таутомера 5-фторурацила с CD ( $K = 140$  л/моль) и квантовый выход FL комплекса [FU • CD] ( $\Phi_i = 37 \times 10^{-4}$ ). Увеличение квантового выхода FL при комплексообразовании (квантовый выход FL свободного дикето-таутомера FU:  $\Phi_0 = 1.3 \times 10^{-4}$ ) объясняется экранированием включенного в полость  $\beta$ -циклодекстрина электронно-возбужденного FU от “тушащего” влияния растворителя. Из полученных результатов следует, что в супрамолекулярных комплексах включения  $\beta$ -циклодекстрина с 5-фторурацилом, моделирующих его свойства в полости биологических объектов по типу “гость-хозяин”, FU находится в дикето-форме и доля токсичных енольных таутомеров в живых системах ничтожно мала.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ № 11-04-97042-р-поволжье-а.

# ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМЫ ЛИНИИ СПЕКТРОВ ЭПР ТРИПЛЕТНОГО ФУЛЛЕРЕНА $C_{70}$ , ПОЛУЧЕННЫХ ПОД НЕПРЕРЫВНЫМ СВЕТОМ: РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ РАСЩЕПЛЕНИЯ В НУЛЕВОМ ПОЛЕ

*\* Уваров М.Н., Кулик Л.В., Пичугина Т.И., Дзюба С.А.*

*ИХКГ СО РАН, Новосибирск, Россия*

*\* uvarov@kinetics.nsc.ru*

Были получены спектры стационарного и импульсного электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) триплетного состояния фуллера  $C_{70}$  в различных стеклообразных матрицах при температурах  $5K \div 260K$  при фотовозбуждении фуллера непрерывным светом ксеноновой лампы.

Методом импульсного ЭПР было показано, что поперечная релаксация несущественно зависит от того положения в спектре ЭПР, где она измерялась. Поэтому обмен в спектре ЭПР вследствие вращений или псевдовращений молекулы  ${}^3C_{70}$  вокруг её длинной оси симметрии не может существенно влиять на форму линии спектра ЭПР.

Путём численного моделирования ЭПР спектров  ${}^3C_{70}$  при 77К с предположением равновесной населённости спиновых подуровней было обнаружено, что параметры тензора расщепления в нулевом поле  $D$  и  $E$  имеют некоторые вероятностные распределения. Наиболее удачное моделирование получалось при гауссовом распределении параметра  $D$ , а функция распределения параметра  $E$  обладала свойством: при  $E = 0$  вероятность равна 0.

При увеличении температуры выше 100К согласно данным, полученным методами импульсного ЭПР, резко увеличивается скорость поперечной релаксации. Это может быть вызвано появлением молекулярных движений вследствие размораживания стеклообразной матрицы окружения. Наше предположение подтверждает сужение формы линии спектра стационарного ЭПР с повышением температуры.

Наличие распределения параметров  $D$  и  $E$  показывает, что эффект Яна-Теллера молекулы  ${}^3C_{70}$  зависит от её локального окружения, причём наблюдаемые в ЭПР спектрах молекулы  ${}^3C_{70}$  имеют группу симметрии не выше  $D_{2h}$ .

# ИЗУЧЕНИЕ АНТИОКСИДАНТНЫХ СВОЙСТВ АНТИГИПЕРЛИПИДЕМИЧЕСКОГО ПРЕПАРАТА АТОРВАСТАТИНА (АТР) ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

*Шлотгауэр А.А., Крупна А.И., \*Лешина Т.В.*

*ИХКГ СО РАН, Новосибирск, Россия*

*\*schlotgauer\_a@mail.ru*

В настоящее время изучению атеросклероза, представляющего собой поражение сосудов в результате отложения в них холестерина, уделяется большое внимание в медицинской химии. Основной целью современной терапии атеросклероза является нормализация холестерина обмена. Самыми популярными лекарственными препаратами, используемыми для этой цели, являются статины. Статины обратимо ингибируют ключевой фермент биосинтеза холестерина 3-гидрокси-3-метилглутарил-коэнзим А редуктазу (ГМГ-КоА-редуктазу). Статины — это разные по структуре соединения, имеющие один общий фрагмент — остаток дигидроксигептановой кислоты, являющийся аналогом природного субстрата ГМГ-КоА-редуктазы. Несмотря на широкое применение статинов в медицине, об их химических свойствах (стабильности, в том числе фотостабильности, окислительно-восстановительных функциях, взаимодействии с другими препаратами и биомолекулами) известно не очень много. В литературе имеются противоречивые данные об антиоксидантной способности самого популярного из статинов — аторвастатина (АТР). Цель настоящей работы — исследование антиоксидантной способности АТР физико-химическими методами на примере реакций с короткоживущими радикалами в растворе и в организованной среде (комплексы “гость-хозяин”, мицеллы). Организованная среда в данном случае использована как модель структурированной среды живого организма. Для изучения генерации радикалов использован фотолиз ацетофенона (AcPh). Анализ продуктов реакции АТР с AcPh, проведенный методами ЯМР и хромато-масс спектрометрии, показал образование аддуктов АТР с кетильными радикалами. Тонкий механизм взаимодействия АТР с короткоживущими кетильными радикалами изучен методом химической поляризации ядер (ХПЯ), включая времяразрешенный вариант. Изучено также влияние организованной среды (мицелл гексадецилтриметиламмоний бромид (СТАВ) и комплексов “хозяин –гость” на примере  $\beta$ -циклодекстрина ( $\beta$ -ЦД) ) на процесс захвата АТР короткоживущих радикалов. Основными результатами работы являются: обнаружение ранее неизвестной фотореакции АТР с AcPh в водной среде; демонстрация антиоксидантной активности АТР относительно короткоживущих радикалов в растворах и организованных средах.



**ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА  
БИОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И  
СИСТЕМ**

# РОЛЬ МЕДИ И ЖЕЛЕЗА В БИОЛОГИЧЕСКОМ ОКИСЛЕНИИ МЕТАНА МЕМБРАНОСВЯЗАННОЙ МЕТАНМОНООКСИГЕНАЗОЙ

*\* Авдеева Л.В., Тухватуллин И.А., Гвоздев Р.И.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*tuman@cat.icp.ac.ru*

Метанотрофы содержат метанмонооксигеназу (ММО), которая бывает двух типов: растворимая (рММО) и мембраносвязанная (мММО). мММО является сложным ферментативным комплексом, в состав которого входят: мембраносвязанная метангидроксилаза (мМГ), NADH-оксидоредуктаза и ряд неизвестных переносчиков электрона.

При выделении и очистке мМГ наблюдается потеря ионов  $\text{Cu}^{2+}$  и ионов  $\text{Fe}^{3+}$ . В литературе утвердилось мнение, что в активный центр мМГ входят ионы меди в составе моно- и биядерных центров [1]. Методом ЭПР мы наблюдали сигнал меди (II). Наблюдали восстановление этого сигнала при введении NADH. Последующее введение пропилена не приводило к изменению формы и интенсивности ЭПР сигнала. Ионы меди могут обратимо удаляться из состава фермента, приводя к полной потере активности фермента [2]. Это указывает на то, что медный центр участвует в реакции окисления метана. Но препараты фермента, содержащие ионы меди и не содержащие ионы железа не обладают ферментативной активностью.

Так же было показано, что ионы железа стимулируют активность везикул, содержащих мМГ в реакции окисления пропилена. Ранее нами был обнаружен интермедиат  $[\text{Fe(III)-Fe(IV)}]$  активного центра мМГ в реакции с перекисью водорода [3].

Таким образом, окисление метана мМГ происходит на биядерном железном центре. Медные центры функционируют как электрон-транспортные центры.

## Литература

- [1] Balasubramanian R., Smith S.M., Rawat S., Yatsunyk L.A., Stemmler T.L., Rosenzweig A.C. // Nature. 2010. V. 465. P. 115.
- [2] Тухватуллин И.А., Куликов А.В., Коршунова Л.А., Гвоздев Р.И., Долтон Г. // ДАН. 1997. т. 352. № 4. с. 549.
- [3] Туманова Л.В., Тухватуллин И.А., Бурбаев Д.Ж., Гвоздев Р.И., Андерссон К.К. // Биоорганическая химия. 2008. т. 34. № 2. с. 194.

# СПЕКТРАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КАТИОННЫХ ТИАКАРБОЦИАНИНОВ С ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТОЙ<sup>1</sup>

<sup>\*1</sup> *Акимкин Т.М.*, <sup>1</sup> *Татиколов А.С.*, <sup>2</sup> *Ярмолюк С.М.*  
<sup>1</sup> *ИБХФ РАН, Москва, Россия*, <sup>2</sup> *ИМБГ НАНУ, Киев, Украина*  
*\*aki.tim@gmail.com*

Гиалуроновая кислота (ГК) представляет собой один из основных биополимеров (из класса гликозаминогликанов) внеклеточных сред различных организмов и выполняет ряд важных структурных и регуляторных функций. Задача по обнаружению и количественной оценке концентрации биополимеров в биосистемах часто решается с помощью спектрально-флуоресцентных зондов. В связи с этим разработка подобных зондов на гиалуроновую кислоту является весьма актуальной задачей. Перспективным классом красителей для поиска таких зондов являются тиакарбоцианины, обладающие свойством специфической упорядоченной агрегации в присутствии различных биополимеров.

В настоящей работе изучено нековалентное взаимодействие с ГК четырех близких по структуре тиакарбоцианиновых красителей: 3,3',9-триметилтиакарбоцианина (Суан2), 3,3'-диметилтиакарбоцианина (Суан45), 3,3'-диэтил-9-метилтиакарбоцианина, 3,3'-диэтилтиакарбоцианина в водном растворе. Обнаружено, что красители Суан2 и Суан45 образуют упорядоченные Н-агрегаты, обладающие коротковолновой (с максимумом около 447 нм) полосой поглощения. Также нами была исследована Н-агрегация красителя Суан2, как наиболее сильно взаимодействующего с ГК, в буферных растворах при различных рН. Для данного красителя произведена оценка числа агрегации и равновесной константы образования агрегатов на ГК. Сделан вывод, что Суан2 может быть предложен в качестве спектрального зонда на ГК. Нами проведены предварительные эксперименты по детекции ГК в реальной биосистеме – стекловидном теле глаза, подтвердившие перспективность Суан2 как зонда на ГК.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 09-04-01054а).

# СПЕКТРОФОМЕТРИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ РАДИАЦИОННО-ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ КУМАРИНОВ В ОБРАТНО-МИЦЕЛЛЯРНЫХ РАСТВОРАХ

*\* Антропова И.Г., Ревина А.А., Чжоу Зин Хтут .*

*РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

*\*antropovai@inbox.ru*

Кумарины широко представлены в растительном мире. Известно, что в зависимости от химической структуры эти соединения проявляют разносторонний спектр биологической активности. Воздействие ионизирующего излучения в химии высоких энергий использовано для генерации реакционно-способных окислительно-восстановительных частиц в растворах.

Проведённые исследования превращений кумаринов в молекулярных водных и водно-органических растворах под действием ионизирующего излучения показали влияние структуры молекул кумаринов, природы растворителей на направление радиационно-химических реакций.

В настоящей работе для изучения поведения кумаринов в биологических системах выбраны обратно-мицеллярные системы (ОМС) в качестве модели биомембран. Использована тройная ОМС состава  $H_2O/AOT/$ изооктан, где АОТ – бис(2-этилгексил)сульфосукцинат натрия. Объекты исследования производных кумарина – 7-гидрокси-4-метилкумарин и 4-метилэскулетин, их содержание в ОМС является величиной постоянной.

Цель данного исследования - определение радиационной чувствительности молекул кумаринов в ОМС в зависимости от структуры кумаринов, дозы облучения, диаметра водного «пула», который зависит от коэффициента сольubilизации, равного [полярная фаза]/[АОТ].

Облучение ампул проведено на установке РХМ- $\gamma$ -20 с источником ионизирующего излучения  $^{60}Co$  в РХТУ имени Д.И. Менделеева при мощности дозы 0.13 Гр/с. Спектры оптического поглощения исходных кумаринов и продуктов радиационно-химического превращения зарегистрированы на приборе СФ-2000 в ультрафиолетовой и видимой областях спектра.

Спектрофотометрически показано влияние структуры обратных мицелл на превращения кумаринов под действием ионизирующего излучения, определено, что выход разложения кумаринов в обратном-мицеллярных растворах выше, чем в спиртовых и водно-спиртовых системах.

## БИОХИМИЧЕСКИЕ МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ ТОКСИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ ПЕСТИЦИДОВ И ИХ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ

<sup>\*1</sup>*Байкова И.С.*, <sup>3</sup>*Саратовских Е.А.*, <sup>2</sup>*Козлова Н.Б.*,  
<sup>2</sup>*Штамм Е.В.*

<sup>1</sup>*ДАР/ВОДГЕО, Москва, Россия*, <sup>2</sup>*ИБХФ РАН, Москва, Россия*,

<sup>3</sup>*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\*ida13@mail.ru*

Загрязнение планеты пестицидами носит глобальный характер, а по силе токсического воздействия на живые организмы сравнимо с радиационной опасностью. Оно приводит к уменьшению плодородия почв, с продуктами питания пестициды попадают в организмы животных и человека и служат причиной возникновения хронических заболеваний и тяжелых патологий. Смываясь осадками с с/х угодий в водоемы и водотоки, они накапливаются в водной среде, в жировых тканях рыб, приводя к массовому их замору в период нереста. В природных и сточных водах пестициды образуют комплексы с металлами. Для прогнозирования и предотвращения последствий применения пестицидов в народном хозяйстве необходимо выяснение механизмов формирования токсического воздействия пестицидов и их металлокомплексов. Изучены действующие вещества восьми пестицидов различной химической структуры, а также бидентатные комплексы лонтрела с ионами 8 металлов. Показано, что разложение гербицида лонтрел с помощью активного ила (АИ) очистных сооружений мало эффективно. Даже химический мутагенез и обработка АИ нитрозометилмочевинной в различных режимах не привели к заметному результату. Разложить лонтрел удалось только облучением жестким ультрафиолетом в течение 4-24 часов. Методами биотестирования нами установлено наличие корреляционной зависимости между токсическими свойствами пестицидов и металлокомплексов гербицида лонтрел и константами их комплексообразования с АТФ, причем металлокомплексы гербицида лонтрел обладают гораздо большей токсичностью, чем сам лонтрел. Таким образом, одним из основных механизмов токсического воздействия пестицидов и их металлокомплексов на живые организмы является нарушение энергетического обмена в клетке за счет энергодифицита, возникающего при связывании АТФ в устойчивые биологически неактивные комплексы.

## ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИЗОБОРНИЛФЕНОЛОВ В МОДЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

*Маракулина К.М., Крамор Р.В., Луканина Ю.К.,  
Мазалецкая Л.И., Шелудченко Н.И., \* Шишкина Л.Н.*

*ИБХФ РАН, Москва, Россия*

*\*shishkina@sky.chph.ras.ru*

Цель работы - изучение физико-химических характеристик изоборнилфенолов (ИБФ), синтезированных под руководством чл.-корр. РАН А.В. Кучина и содержащих в качестве алкильного заместителя одну или несколько изоборнильных групп, в различных модельных системах. Исследованы следующие ИБФ: 4-метил-2-изоборнилфенол (ТФ-5), 2-метил-6-изоборнилфенол (ТФ-8), 2-оксиизоборнилфенол (ТФ-1), 2-изоборнилфенол (ТФ-6), 4-метил-2,6-диизоборнилфенол (ТФ-7), а также ионол (ВНТ) - стандартный антиоксидант (АО) из класса пространственно-затрудненных фенолов.

Антирадикальную активность ИБФ определяли волюметрически в модельной реакции инициированного окисления этилбензола. Для всех исследованных ИБФ стехиометрический коэффициент ингибирования был близок к 2. По уменьшению величины  $k_7$  исследованные АО можно расположить в ряд: ТФ-7 > ТФ-5 > ТФ-8 > ТФ-6 > ВНТ > ТФ-1.

Определение антипероксидной активности (АПА) препаратов при комнатной температуре показало, что на величину показателя влияют не только степень затрудненности ОН-группы, но, возможно, и распределение электронной плотности в молекуле. По уменьшению способности разлагать пероксиды все исследованные антиоксиданты можно расположить в ряд: ТФ-6  $\geq$  ТФ-7  $\geq$  ТФ-8  $\geq$  ТФ-1  $\geq$  ТФ-5 > ВНТ

В УФ- спектрах ИБФ наблюдается основной пик поглощения при 200-205 нм и плато в области 270-290 нм. По данным ИК-спектроскопии ТФ-5, ТФ-6, ТФ-7 и ТФ-8 характеризуются валентными колебаниями несвязанной ОН-группы в диапазоне частот от 3621 до 3612  $\text{см}^{-1}$ , а в молекуле ТФ-1 обнаружено наличие внутримолекулярной водородной связи.

Таким образом, ИБФ способны влиять на разные стадии процесса перекисного окисления липидов, что следует учитывать при изучении их биологической активности.

# ИНГИБИРОВАНИЕ ПЕРОКСИДНОГО ОКИСЛЕНИЯ ЛИПИДОВ ВОДОРАСТВОРИМЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ ФУЛЛЕРЕНА C<sub>60</sub><sup>1</sup>

<sup>\*2</sup>Мищенко Д.В., <sup>2</sup>Рыбкин А.Ю., <sup>2</sup>Корнев А.Б.,  
<sup>2</sup>Файнгольд И.И., <sup>2</sup>Хакина Е.А., <sup>2</sup>Полетаева Д.А.,  
<sup>2</sup>Смолина А.В., <sup>2</sup>Котельникова Р.А., <sup>2</sup>Трошин П.А.,  
<sup>2</sup>Богданов Г.Н., <sup>1</sup>Романова В.С.

<sup>1</sup>ИНЭОС РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия

\*mdv@icp.ac.ru

Известно, что пероксидное окисление липидов (ПОЛ) играет важную роль во многих физиологических процессах в норме, а также при различных патологиях. Нарушение антиоксидантного гомеостаза приводит к развитию оксидативного стресса, сопровождающего воспалительные, нейродегенеративные и онкологические заболевания, а также преждевременное старение. Это служит основанием для использования в клинике антиоксидантов. Благодаря уникальным донорно-акцепторным свойствам наиболее эффективными антиоксидантами могли бы стать водорастворимые производные фуллерена C<sub>60</sub> (ВПФ). Антиоксидантную активность ВПФ оценивали по их влиянию на накопление малонового диальдегида (МДА) - конечного продукта ПОЛ, а также по изменению площади под кинетической кривой индуцированной хемилюминесценции, пропорциональной количеству свободных радикалов в системе. Обнаружено, что исследованные ВПФ проявляют антирадикальные свойства и способны взаимодействовать со свободными радикалами, образующимися в модельной системе. Показано, что наиболее эффективными антиоксидантами являются гибридные ВПФ, способные ингибировать до уровня нормы инициированное ПОЛ. Это может быть связано с акцепторными свойствами сфероида фуллерена и антиоксидантным действием присоединенных аддендов, таких как: карнозин и нитроксильные радикалы. Впервые обнаружена корреляция между развитием ЦМВИ и изменением уровня ПОЛ в инфицированных клетках фибробластов человека. Следует отметить, что натриевая соль  $\gamma$ -аминомасляной кислоты фуллерена (C<sub>60</sub>-AMNa) - является более эффективным ингибитором ПОЛ и цитомегаловирусной инфекции ЦМВИ, чем аминокaproновая кислота и известный клинический препарат - ганцикловир. Выявлена способность C<sub>60</sub>-AMNa транспортироваться через фосфолипидную мембрану, что имеет важное значение, так как позволяет ВПФ включаться в инфицированные клетки без участия белков-переносчиков.

<sup>1</sup>Исследования поддержаны Программой Президиума РАН № 22 и грантом РФФИ 10-03-00687.

## РАДИАЦИОННАЯ ДЕСТРУКЦИЯ ПОЛИСАХАРИДНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ

<sup>2</sup> *Пыи Пьо Аунг*, <sup>\*</sup> *Фенин А. А.*, <sup>1</sup> *Шарпатый В. А.*

<sup>1</sup> *ИБХФ РАН, Москва, Россия*, <sup>2</sup> *РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

*\*fmkfenin@bk.ru*

Пусковым процессом деструкции студня является образование первичного радикала – радикала отрыва Н или  $\dot{O}H$  от оксиметильного звена. В любом таком акте рвутся водородные связи, соединяющие макромолекулы крахмала с цепочечными мостиками из молекул воды. Тем самым разрушается одна из составляющих единиц трёхмерной структуры ячеек сети в студне. Находящиеся в этих ячейках молекулы воды при разрушении хотя бы одного из присущих ячейке «рёбер» «выливаются» из последней. Студни из картофельного крахмала с содержанием крахмала от 3 до 16 % облучали в дозе от 2 до 80кГр. После облучения отделяли центрифугированием «сухой» продукт от выделившейся жидкости. Затем определяли массу выделившейся синергетической жидкости. По начальным участкам кривых выделения воды были рассчитаны значения радиационно-химического выхода синергетической жидкости, которые составили от  $3 \cdot 10^3$  до  $8 \cdot 10^4$ .

«Астрономические» величины радиационно-химического выхода выделения воды в исследовавшихся образцах позволяют предположить, что во всех этих системах присутствует «свободная» вода, которая действительно выделяется из мешочка-ячейки трехмерной сетки при возникновении макрорадикала (т.е. дефекта в стенке этого мешочка). Соотношение выхода синергетической жидкости и выхода первичных радикалов позволяют оценить размеры ячейки воды в гидрогеле. Учитывая, что  $\bar{e}$  не принимает участия в образовании радикалов из полисахаридов, а лишь радикалы  $\dot{O}H$  и Н, то максимальная величина выхода радикалов, вовлекаемых в реакции, равняется 13,5 при предельном количестве пар  $\dot{O}H$  и Н ( $4,5+4,5+4,5=13,5$ ) из возбужденных и  $\dot{O}H$  из частично рекомбинирующих по реакции ионизированных молекул воды. Таким образом разделив полученный радиационно-химический выход синергетической жидкости на величину 13,5 получаем количество молекул воды в одном «мешочке». Предположив ячейку кубической, определили размеры трехмерной ячейки, исходя из того, что молекулы «свободной» воды находятся друг от друга, по крайней мере, на расстоянии  $3,2\text{\AA}$  (вне пределов образования водородной связи). Результаты расчетов говорят о том, что размеры трехмерной ячейки составляют от 60 до  $24\text{\AA}$  для студней с содержанием крахмала от 3 до 16 %.



# ОЦЕНКА АНТИОКСИДАНТНЫХ СВОЙСТВ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФУЛЛЕРЕНА C<sub>60</sub> МЕТОДОМ ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ<sup>1</sup>

*\* Рыбкин А.Ю., Мищенко Д.В., Хакина Е.А., Корнев А.Б.,  
Смолина А.В., Трошин П.А., Богданов Г.Н.,  
Котельникова Р.А., Котельников А.И.  
ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия  
\* pbib@mail.ru*

Увеличение интенсивности пероксидного окисления липидов (ПОЛ) сопровождается множеством заболеваний. Исходя из этого, использование антиоксидантов в терапии различных болезней является теоретически обоснованным. Благодаря выраженным антирадикальным свойствам производных фуллеренов, создание на их основе лекарственных препаратов представляет интерес для исследователей. Целью работы являлось определение антиоксидантных свойств водорастворимых производных фуллерена (ВПФ) методом хемилюминесценции.

В качестве исследуемой модельной системы использовали субклеточный гомогенат головного мозга мышей (0,1 мг/мл белка) в буфере Трис-НСl (0,1 М, рН 7,4). Инициирование пероксидного окисления липидов в гомогенате осуществляли с помощью трет-бутил гидропероксида ( $7,3 \cdot 10^{-2}$ М). Кинетику сигнала хемилюминесценции регистрировали на приборе Luminometr-1250 LKB Wallak в течение 20 минут. Интенсивность ПОЛ оценивали по площади под кинетической кривой интенсивности (т.н. светосумме) люминесценции люминола ( $5 \cdot 10^{-5}$ М). Антирадикальная активность производных фуллерена оценивалась при действующей концентрации  $10^{-5}$ М. Для сравнения регистрировали сигнал люминола в присутствии известного антиоксиданта ионола.

В работе изучалось 21 водорастворимое производное фуллеренов. Установлено, что большинство соединений способны ингибировать ПОЛ. Наиболее выраженным антирадикальным действием обладали производные ТР-1106 (56%), КВ-445 (53%) и КВ-449 (64%) (в скобках указан процент ингибирования ПОЛ в образцах), в то время, как КВ-197, КВ-451, НК-205 практически не влияют на ПОЛ. Ионол показал снижение светосуммы на 49% по сравнению с контролем.

Полученные результаты свидетельствуют о перспективности дальнейшего исследования ВПФ в качестве эффективных антиоксидантов для терапии целого ряда заболеваний (онкологических, нейродегенеративных, инфекционных и др.).

<sup>1</sup>Исследования поддержаны Программой Президиума РАН № 22 и грантом РФФИ 10-03-00687.

## РОЛЬ АНТИОКСИДАНТНЫХ И ЛИПОПРОТЕКТОРНЫХ СВОЙСТВ АКАТИНОЛА МЕМАНТИНА ПРИ ЛЕЧЕНИИ БОЛЕЗНИ АЛЬЦГЕЙМЕРА

*\* Рыжкова О.В., Круговов Д.А., Алесенко А.В.*

*ИБХФ РАН, Москва, Россия*

*\*dioxan@yandex.ru*

В настоящий момент акцент многих исследований причин гибели нейронов при деменции Альцгеймеровского типа концентрируется на функции липидов, которые, как предполагается, могут играть ключевую роль в амилоидогенезе и нейрональной дисфункции. В клинической практике применяется ряд препаратов, влияющих на когнитивные функции мозга. Однако влияние данных препаратов на липидный метаболитизм и возможную его коррекцию в процессе лечения редко исследуется. Целью нашего исследования явилось определение влияния Акатинола мемантина (АМ) – неспецифического блокатора глутаматных рецепторов – на окислительный потенциал липидов и молекулярные виды холинсодержащих фосфолипидов плазмы крови в процессе лечения БА.

Пациенты проходили курс лечения в отделе по изучению болезни Альцгеймера Научного центра психического здоровья РАМН. Плазму крови брали от пациентов до и после лечения препаратами. В качестве контрольной группы были пациенты, не проходившие лечение. Липиды из плазмы крови пациентов с болезнью Альцгеймера извлекали по методу Блайя – Дайера. Скорость окисления липидов плазмы крови измеряли при окислении липидов молекулярным кислородом в растворе хлорбензола в присутствии инициатора азоизобутиронитрила в термостатированной ячейке с использованием волюмометрической установки типа «Варбург». Исследование содержания липопероксидов проводилось спектрофотометрически тиоционатным методом. Спектр молекулярных видов холинсодержащих фосфолипидов (фосфатидилхолина, лизофосфатидилхолина и сфингомиелина), а также фосфатидилэтаноламина, который не содержит холиновой группировки в своей структуре, определяли методом хромато-масс спектрометрии.

При исследованиях способности АМ ингибировать окислительные процессы было установлено его антиоксидантные свойства, что особенно важно для лечения БА, так как окислительный стресс является одним из наиболее важных составляющих патогенеза нейродегенеративных нарушений. Показано, что содержание липопероксидов в экстрактах из плазмы крови больных после лечения АМ значительно ниже, чем до лечения.

**ВЛИЯНИЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ  
ПОЛИЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФУЛЛЕРЕНА  
C<sub>60</sub> НА КАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ  
МЕМБРАНОСВЯЗАННЫХ ФЕРМЕНТОВ  
МОНОАМИНООКСИДАЗЫ А И  
МОНОАМИНООКСИДАЗЫ В <sup>1</sup>**

*\* Смолина А.В., Корнев А.Б., Полетаева Д.А.,  
Хакина Е.А., Файнгольд И.И., Рыбкин А.Ю.,  
Мищенко Д.В., Котельникова Р.А., Богданов Г.Н.,  
Трошин П.А., Котельников А.И.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\* ansmolina@gmail.com*

В работе исследовалось влияние водорастворимых полизамещенных производных фуллера C<sub>60</sub> (ВПФ) на каталитическую активность ферментов: моноаминоксидазы А (МАО-А) и моноаминоксидазы В (МАО-В), осуществляющих окислительное дезаминирование биогенных аминов в митохондриях головного мозга крыс. Показано, что соединения KB-197, KB-213, TP-1106, TP-1107, OL-395, НК-205, НК-212, НК-221, KB-387, KB-443, KB-449, KB-450, KB-452 увеличивают каталитическую активность МАО-А и снижают активность МАО-В. Как известно, повышение активности МАО-А приводит к уменьшению содержания адреналина в организме, а также к улучшению памяти и снижению агрессивности животных. Ингибирование МАО-В обуславливает пролонгирование эффектов синаптического дофамина, в чем и состоит теоретическое обоснование использования ингибиторов МАО-В при терапии нейродегенеративных заболеваний: болезни Паркинсона и болезни Альцгеймера. Полученные результаты позволяют рассматривать данный ряд соединений в качестве потенциальных адаптогенов и нейропротекторов для терапии нейродегенеративных нарушений. Соединения TP-1105, НК-201, KB-444 являются эффективными ингибиторами МАО-А и МАО-В. Следует отметить, что соединение KB-444 обладает наиболее выраженным ингибирующим действием как в отношении МАО-А, так и в отношении МАО-В. Известно, что ингибиторы МАО-А, согласно протоколам ВОЗ, являются одной из мишеней для отбора антидепрессантов. Следовательно, это соединение можно рассматривать в качестве потенциального антидепрессанта, а также нейропротектора для терапии нейродегенеративных патологий. Установлено, что ряд водорастворимых полизамещенных производных фуллера C<sub>60</sub> обладает нейропротекторной активностью.

---

<sup>1</sup>Исследования поддержаны Программой Президиума РАН № 22 и грантом РФФИ 10-03-00687.

## ПЕРОКСИНИТРИТЗАВИСИМЫЙ ГЕМОЛИЗ ЭРИТРОЦИТОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СЕРА-НИТРОЗИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА

*\* Соколова Е.М., Руднева Т.Н., Нешев Н.И., Психа Б.Л.,  
Санина Н.А., Блохина С.В.  
ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия  
\*Ekaterina\_Sokolova89@mail.ru*

Оксид азота в качестве регуляторного фактора, осуществляет в организме важные биологические функции, связанные с регуляцией уровня кровяного давления, ингибированием тромбообразования, передачей нервных импульсов. Известны также цитотоксические свойства NO, с которыми связано его участие в системе неспецифической иммунной защиты. В то же время, цитотоксичность оксида азота в ряде случаев может обращаться против собственного организма и выступать в качестве ведущего патогенетического фактора многих воспалительных и нейродегенеративных заболеваний.

В широком диапазоне концентраций была исследована кинетика гемолиза эритроцитов и окисления внутриэритроцитарного гемоглобина под действием шести синтетических сера-нитрозильных комплексов железа (СНКЖ), состава  $[\text{Fe}_2(\text{SR})_2(\text{NO})_4]$ , где R —  $\text{SO}_3$ , пиримидин-2-ил, 1-метил-имидазол-2-ил, бензотиазол-2-ил, цистеинамин, пеницилламин, которые способны выделять оксид азота в результате спонтанного гидролитического разложения. Пять из шести изученных комплексов при добавлении к 0.2%-ной суспензии эритроцитов мыши показали выраженный концентрационнозависимый гемолитический эффект. Гемолитическую активность СНКЖ характеризовали величиной периода индукции гемолиза. Гемолизу предшествовало окисление гемоглобина проникающим внутрь клетки оксидом азота, которое описывалось кинетическим уравнением первого порядка. Были определены эффективные константы скорости реакции первого порядка, характеризующие NO-донирующую способность изученных комплексов. Обсуждается взаимосвязь между NO-донирующей способностью СНКЖ и их гемолитической активностью.

Предполагается, что гемолиз эритроцитов в исследуемой системе возникает как следствие биохимической трансформации оксида азота внутри эритроцитов. Непосредственным химическим индуктором гемолиза является, по-видимому, высокореакционноспособный продукт взаимодействия оксида азота и супероксидного анион радикала — пероксинитрит. Это согласуется с имеющимися в литературе представлениями о пероксинитрите как важном источнике цитотоксичности, связанной с метаболизмом оксида азота в живых организмах.

## ОСОБЕННОСТИ РАДИАЦИОННОЙ ДЕСТРУКЦИИ ФЕНОЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ В СТРУКТУРИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ

<sup>\*2</sup> Фенин А.А., <sup>2</sup> Шубина П.А., <sup>2</sup> Пью Пью Аунг,  
<sup>1</sup> Шарпатов В.А.

<sup>1</sup> *ИБХФ РАН, Москва, Россия,* <sup>2</sup> *РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва,*  
*Россия*

*\* fmkfenin@bk.ru*

Показано, что процесс разрушения веществ обладающих радиопротекторной активностью в гидрогелях происходит существенно эффективнее по сравнению с водными и водно-органическими системами. Высказано предположение, что возможна передача энергии возбуждения от системы в целом к фенольным соединениям.

В данной работе исследовалась возможность защиты клетки от действия излучения протекторами в достаточно малых концентрациях (порядка  $10^{-4}$  моль/л). Для этого были рассмотрены 2 системы: овощ и вода-крахмал в студнеобразном состоянии. Протекторную активность исследованных соединений таких как: экстракт антоцианов их цветков Гибискуса, кверцети, рутин; оценивали по их способности предотвращать разрушение систем структурированных полисахаридами с выделением синергетической жидкости. Показано что указанные соединения препятствовали разрушению этих систем за счет распада протекторов. Этот вывод следует из результатов экспериментов по экстракции красителей из облучённых систем. Необходимо отметить, что в отличии от водно-спиртовых растворов рутин (рамногликозид кверцетина) интенсивнее кверцетина разлагается в структурированной системе. Это можно объяснить возможностью рутина встраивать свою гликозидную часть в структуру крахмальных звеньев, в результате чего возможна более эффективная передача энергии возбуждения от системы к акцептору эта гипотеза позволяет дать объяснение и того что красители в малых концентрациях защищают систему от разрушения.

## РАЗРАБОТКА СТАНДАРТНОГО ОБРАЗЦА СОСТАВА АНТИОКСИДАНТА НА ОСНОВЕ АМБИОЛ ГИДРОХЛОРИДА

*\*Филлипова К.Н., Клименко И.В., Журавлева Т.С.,  
Мисин В.М., Кузнецов Ю.В.  
ИБХФ РАН, Москва, Россия  
\*flippova.kristin@yandex.ru*

Одним из современных направлений исследования антиоксидантов является получение достоверных количественных данных их содержания в пищевых продуктах и напитках, а также создание банка данных. Как известно, основными характеристиками стандартного образца являются стабильность и однородность, однако в литературе не приводятся данные по этим показателям качества, так как для антиоксидантов нет стандартных образцов сравнения. Поэтому поиск вещества, которое может служить стандартным образцом состава, является главной задачей при разработке надежных методик определения антиоксидантов.

Данная работа является первым этапом исследований по созданию стандартных образцов состава антиоксидантов. В качестве объекта исследований выбран амбиол гидрохлорид (производитель ИБХФ РАН), который является экологически чистым стимулятором роста растений и представляет собой антистрессовый антиоксидант комплексного действия, обладающий антимуtagenными и радиозащитными свойствами. Амбиол гидрохлорид практически не исследован и представляет интерес в качестве образца сравнения антиоксиданта.

С помощью UV-VIS спектрофотометра TU 1901 фирмы «Люмэкс» в диапазоне 210-800 нм исследованы спектры поглощения 50 образцов растворов амбиол гидрохлорида ( $C=20$  мг/л) в дистиллированной воде. Образцы хранили в разных условиях: в холодильнике и при комнатной температуре. Содержание амбиол гидрохлорида измеряли 1 раз в неделю в течение 77 дней.

Установлено, что растворы амбиол гидрохлорида достаточно стабильны и могут быть использованы в качестве материала для стандартного образца состава антиоксиданта, причем такой фактор как снижение температуры увеличивает их стабильность.

## ВЛИЯНИЕ ФЕНОЗАНА КАЛИЯ НА СТРУКТУРУ ПЛАЗМАТИЧЕСКИХ МЕМБРАН IN VITRO

\* Часовская Т.Е., Пальмина Н.П.

ИБХФ РАН, Москва, Россия

\*t.chasovskaya@yandex.ru

Фенозан калия (ФК) – синтетический антиоксидант, способный существенно модифицировать состояние биологических мембран. В плазматических мембранах (ПМ) сосредоточены важные регуляторные системы клетки: пероксидного окисления липидов (ПОЛ), фосфоинозитидный цикл, система циклических нуклеотидов. Принимая во внимание тесную взаимосвязь между ПОЛ и микровязкостью липидов, в данной работе мы изучали действие ФК *in vitro* в широком диапазоне концентраций ( $10^{-4}$ – $10^{-21}$  М) на структурное состояние липидной компоненты ПМ, выделенных из печени мышей. Структурные изменения в липидном бислое мембран наблюдались с помощью ЭПР-спектрометра «Bruker-200D» (Германия) методом спиновых зондов с использованием стабильных нитроксильных радикалов 5- и 16-доксилстеариновых кислот ( $C_5$  и  $C_{16}$ ) для определения жесткости поверхностных областей ( $8\text{\AA}$ ) и микровязкости глубоколежащих областей мембраны ( $20\text{\AA}$ ) соответственно. Данным методом было установлено, что ФК вызывает статистически достоверное увеличение обеих структурных характеристик. Концентрационная зависимость эффекта ФК имеет нелинейный полимодальный характер с двумя максимумами ( $10^{-6}$ – $10^{-7}$ ;  $10^{-14}$ – $10^{-15}$  М) в поверхностных областях (зонд  $C_5$ ), и двумя максимумами ( $10^{-5}$ – $10^{-7}$ ;  $10^{-18}$ – $10^{-19}$  М) в глубоколежащих областях бислоя (зонд  $C_{16}$ ). При этом первые максимумы для обоих зондов совпадают, а вторые (в диапазоне сверхнизких концентраций) различаются. В промежутках между максимумами эффект ФК не наблюдался. Мы также установили появление дополнительных термоиндуцированных структурных переходов в липидах по сравнению с контролем для обоих зондов при действии сверхнизких концентраций ФК. В поверхностных областях дополнительный переход наблюдается при температурах  $22$ – $26^\circ\text{C}$  под воздействием ФК в концентрациях  $10^{-14}$  и  $10^{-15}$  М. В глубоколежащих областях – при температурах  $40$ – $42^\circ\text{C}$  под воздействием ФК в концентрации  $10^{-18}$  М. Все обнаруженные изменения структурного состояния липидной компоненты ПМ под действием ФК могут оказывать существенное влияние на активность мембраносвязанных ферментов и регуляторных систем.

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СИГНАЛЬНЫХ СИСТЕМ ОКСИДА АЗОТА И СФИНГОМИЕЛИНОВОГО ЦИКЛА ПРИ ИШЕМИИ/РЕПЕРФУЗИИ

<sup>\*1</sup> Шупик М.А., <sup>1</sup> Алесенко А.В., <sup>2</sup> Ванин А.Ф.,

<sup>2</sup> Миколян В.Д.

<sup>1</sup> ИБХФ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup> ИХФ РАН, Москва, Россия

\*mariashupik@gmail.com

Оксид азота (NO) привлекает интерес исследователей необычайным разнообразием своих биологических функций, в том числе при развитии ишемии/реперфузии и апоптозе. В настоящее время интенсивно изучается пересечение сигнальных систем NO и сфингомиелинового цикла (СФМ-цикл). СФМ-цикл представляет ферментативное расщепление сфингомиелина с последующей генерацией проапоптотических агентов, таких как церамид и сфингозин. NO в зависимости от концентрации и типа клеток способен как вызывать апоптоз, генерацию церамида и активировать сфингомиелиназы (СФМ-азы), так и ингибировать апоптоз и накопление церамида. В свою очередь, церамид и СФМ-азы могут повышать уровень экспрессии NO-синтаз, активировать их, приводить к накоплению нитритов и нитратов во внутриклеточной среде, или, наоборот, ингибировать NO-синтазы. СФМ-цикл и генерация NO могут быть активированы накоплением фактора некроза опухолей (ФНО) и окислительным стрессом, которые являются одними из ключевых событий при ишемии/реперфузии. Мы показали, что при ишемии печени первым значимым событием является экспрессия ФНО уже через 15 мин после прекращения кровотока, в то время как изменение содержания NO, происходит только через 30 мин, что подтверждает то, что ФНО может вызывать повышение концентрации NO. Спустя 60 мин реперфузии фрагменты ДНК представляют собой типичную апоптотическую “лестницу”. Накопление ФНО происходит как при ишемии, так и при реперфузии, однако деградация ДНК наблюдается лишь при реперфузии, когда активируется нейтральная СФМ-аза, что приводит к накоплению церамида. При изучении влияния соединений-доноров NO на СФМ-цикл, нами показано, что доноры NO в низких концентрациях ингибируют активность СФМ-азы и понижают содержание церамида. Однако высокие дозы доноров NO активируют СФМ-цикл. Зависимость активности СФМ-азы от концентрации NO может указывать на то, что активация фермента при реперфузии вызывается высокими концентрациям NO, содержание которого резко повышается после восстановления кровотока. Полученные результаты подчеркивают возможность пересечения сигнальных систем и СФМ-цикла в норме и при развитии ишемии/реперфузии.



**НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ НОВЫХ  
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ  
ПРОЦЕССОВ**

**ПРИМЕНЕНИЕ ИОНООБМЕННЫХ МЕМБРАН РАЗНОЙ  
ПРИРОДЫ И СТРУКТУРЫ ПРИ ВЫДЕЛЕНИИ  
АРОМАТИЧЕСКОЙ АМИНОКИСЛОТЫ ИЗ  
САХАРОСОДЕРЖАЩИХ СРЕД  
МИКРОБИОЛОГИЧЕСКОГО СИНТЕЗА  
СТАЦИОНАРНЫМ ДИАЛИЗОМ**

*Воробьёва Е. А., \* Васильева В. И.*

*ВГУ, Воронеж, Россия*

*\* vorobjeva\_ea@mail.ru*

При совершенствовании и создании новых технологических решений для выделения аминокислот из ферментативных сред необходимы поиски возможностей интенсификации диффузионного переноса аминокислот в мембранных системах. Изучение избирательного транспорта аминокислоты при стационарном диализе ее смеси с моносахаридом с использованием мембран различной природы проводилось сравнительным анализом экспериментальных данных по диффузионному переносу фенилаланина и глюкозы из смешанных эквимолярных растворов. Катионообменные мембраны (гомогенная-МФ-4СК, гетерогенные-МК-40 и МК-41) использовались в водородной форме, а анионообменные (гетерогенные-МА-40 и МА-41) - в гидроксильной форме, так как при этом обеспечивались значительно большие потоки аминокислоты по сравнению с солевыми формами мембран (явление «облегченного транспорта»).

Максимальный поток аминокислоты был зафиксирован для водородной формы гомогенной сульфокатионообменной мембраны МФ-4СК, характеризующейся минимальной толщиной по сравнению с другими типами мембран. Среди катионообменных мембран минимальный поток аминокислоты наблюдался для фосфорнокислой мембраны МК-41 в связи с её небольшой влагоемкостью и обменной ёмкостью. Для анионообменных мембран аминокислота хуже переносилась через мембрану МА-40. Для моносахарида глюкозы величины потоков через все исследуемые типы мембран были на порядок ниже по сравнению с фенилаланином.

Различная проницаемость мембран к компонентам раствора приводила к тому, что диффундирующие из эквимолярного раствора фенилаланин и глюкоза имели разные концентрации в приемной секции диализной ячейки. Максимум эффективности разделения наблюдался в диапазоне малых концентраций, характерных для реализации явления «облегченного транспорта» аминокислоты, а потоки глюкозы, препятствующие диффузии фенилаланина, еще малы.

## СИНТЕЗ КАТИОННОГО ПОЛИ-1,3-ПЕНТАДИЕНА ПОД ДЕЙСТВИЕМ КОМПЛЕКСА ГУСТАВСОНА

*\*Коровина Н.А., Розенцвиг В.А.*

*ИЭВБ РАН, Тольятти, Россия*

*\*nellit@mail.ru*

Процесс полимеризации 1,3-пентадиена в присутствии комплекса Густавсона ( $\text{AlCl}_3 \bullet \text{ксилол} \bullet 0.5 \text{ HCl}$ ) характеризуется нестационарным характером. Независимо от исходной концентрации мономера наиболее высокие скорости полимеризации наблюдаются на начальном этапе процесса. Через 1-2 минуты после введения в реакционную массу каталитического комплекса обнаружено резкое замедление реакции, однако процесс полимеризации не останавливается и при достаточной продолжительности достигается количественный выход полимера. Использование комплекса Густавсона позволяет проводить катионную полимеризацию 1,3-пентадиена с высокой скоростью и выходом полимера при более низких концентрациях катализатора, по сравнению с процессом полимеризации под действием  $\text{AlCl}_3$  и катализаторов на основе хлоридов ванадия и титана. Начальная скорость полимеризации 1,3-пентадиена прямо пропорциональна концентрации каталитического комплекса в реакционной массе. С повышением исходной концентрации 1,3-пентадиена с 2.0 до 5.0 моль/л наблюдается возрастание начальной скорости полимеризации. При дальнейшем увеличении исходной концентрации мономера до 8.0 моль/л скорость уменьшается. Экстремальный характер зависимости начальной скорости от исходной концентрации мономера ранее отмечался для катионной полимеризации 1,3-пентадиена под действием галогенидов титана и ванадия, а также изопрена и циклоокта-1,3-диена.

В зависимости от условий полимеризации синтезированный поли-1,3-пентадиен характеризуется моно- или полимодальным молекулярно-массовым распределением за счет образования в ходе процесса высокомолекулярной фракции. Регулирование молекулярных характеристик полимера достигается изменением исходной концентрации мономера и температуры полимеризации. Методами  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектроскопии установлено, что ненасыщенность поли-1,3-пентадиена не зависит от конверсии мономера и уменьшается с 58 до 52 моль

# КОНВЕРСИЯ ПРИРОДНОГО ГАЗА В СИНТЕЗ-ГАЗ И ВОДОРОД В ОБЪЕМНЫХ ПЕНОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТРИЦАХ

<sup>2</sup>*Рахметов А.Н.*, <sup>\*1</sup>*Шаповалова О.В.*

<sup>1</sup>*ИХФ РАН, Москва, Россия*, <sup>2</sup>*МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*\*shapovalova.oksana@gmail.com*

Водороду в современном двигателестроении отводится особая роль как экологически чистому альтернативному моторному топливу. В настоящее время водород производится в основном в процессах каталитической паровой или парокислородной конверсии природного газа и угля, а также в различных комбинированных циклах. Эти сложные энергоемкие процессы трудно представить в качестве источника водорода даже для стационарных источников энергоснабжения небольшой мощности, которые, по прогнозам, в ближайшем будущем будут играть заметную роль в энергетике. Такая ситуация заставляет интенсивно искать новые пути получения водорода или богатого водородом синтез-газа.

В работах [1] было предложено использовать для получения синтез-газа и водорода поверхностное горение природного газа в трёхмерных проницаемых матрицах в условиях запертого ИК-излучения.

В данной работе рассмотрена возможность конверсии природного газа в синтез-газ в объемной горелке в пенометаллических матрицах. Пеноматериалы - класс материалов ячеистой структуры, имеющие крайне низкую плотность в сочетании с высокой удельной прочностью, поверхностью и шумопоглощением, низким гидравлическим сопротивлением.

Была изучена конверсия метана в матрицах изготовленных из нескольких базовых металлов различной пористости и толщины. Результаты показали, что удается достичь высоких выходов основных продуктов при полной конверсии метана при  $\alpha = 0.5-0.55$ .

## Литература

- [1] Арутюнов В.С., Шмелев В.М., Лобанов И.Н., Политенкова Г.Г. Генератор синтез-газа и водорода на основе радиационной горелки. ТОХТ, 2010. №1. С.21-30

# КОНВЕРСИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ КОМПОНЕНТОВ ПРИ ОКИСЛЕНИИ СМЕСЕЙ ЛЕГКИХ АЛКАНОВ

*Фокин И.Г.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*ilia@icp.ac.ru*

Огромный объем сжигаемого в факелах попутного нефтяного газа (ПНГ) - важнейшая проблема ТЭК России [1]. Вследствие высокой склонности ПНГ к смоло- и сажеобразованию невозможно его использование в качестве энергетического топлива без предварительной очистки от тяжелых фракций. Одним из возможных вариантов решения этой задачи является селективная окислительная конверсия  $C_{3+}$  компонентов ПНГ.

Для оценки перспективности этого варианта были проведены экспериментальные исследования парциального окисления смесей  $C_1-C_4$  алканов. Установлено, что при концентрациях кислорода 1,0 – 7,0% и давлениях 10 – 40 атм протекает преимущественное окисление  $C_3-C_4$  углеводородов, сопровождающееся увеличением концентрации метана. Основными газофазными продуктами, помимо метана, являются  $C_2-C_3$  олефины, водород и оксид углерода. В жидкой фазе содержатся вода, метанол, формальдегид, а также примеси этилового и пропиловых спиртов, муравьиной и уксусной кислот.

Полученные результаты указывают на то, что в данных условиях может осуществляться селективное окисление  $C_{3+}$  компонентов смеси. Что, в свою очередь, открывает возможность применения окислительной конверсии тяжелых фракций ПНГ для его использования в качестве энергетического топлива [2].

## Литература

- [1] В. С. Арутюнов. Попутный газ: проблемы и перспективы // Газовый бизнес, 2009. № 6. С. 10-12.
- [2] И. Г. Фокин, В. И. Савченко, В. М. Рудаков, В. С. Арутюнов. Селективная окислительная конверсия тяжелых фракций попутных газов для их использования в энергоустановках // Горение и взрыв. Вып. 3 / Под общ. ред. С. М. Фролова. – М.: ТОРУС ПРЕСС, 2010. С. 44-48.



**НОВЫЕ И ВОЗОБНОВЛЯЕМЫЕ  
ИСТОЧНИКИ ЭНЕРГИИ.  
АЛЬТЕРНАТИВНАЯ ЭНЕРГЕТИКА**

# СИНТЕЗ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГЕЛЬ-ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭФИРДИАКРИЛАТОВ И 1 М LiClO<sub>4</sub> В ГАММА-БУТИРОЛАКТОНЕ

*\* Баскакова Ю.В., Ярмоленко О.В., Богданова Л.М.,  
Джавадян Э.А., Ефимов О.Н.  
ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия  
\* yuvl@icp.ac.ru*

Полимерные гель-электролиты (ПГЭ) находят все большее применение в литиевых и литий-ионных источниках тока, поэтому поиск новых электролитных систем с высокой ионной проводимостью и хорошими механическими свойствами является весьма актуальной задачей.

В ходе данной работы были синтезированы гель-электролиты на основе полиэфирдиакрилатов (ПЭДА) и 1 М раствора LiClO<sub>4</sub> в гамма-бутиролактоне. Особенностью строения цепи ПЭДА является чередование звеньев, включающие простые и сложноэфирные группы. Кроме того, в основную цепь дополнительно введены NHCO-группы, увеличивающие полярность молекулы полимера, что способствует переносу иона Li<sup>+</sup> и удержанию жидкого электролита полимерной матрицей. На концах цепи ПЭДА имеются две двойные связи, которые раскрываются при термоиницировании с образованием сетчатого полимера. По способу синтеза олигомер также содержит в своем составе до 10 мас. % крауноподобных циклических структур - 1,6-диоксо-14-краун-4. При полимеризации ПЭДА непосредственно в среде жидкого органического электролита (до 85 мас. %) образуется “гомогенный” гель. Исследована кинетика радикальной полимеризации ПЭДА в 1 М LiClO<sub>4</sub> в гамма-бутиролактоне в присутствии инициаторов азоизобутиронитрила и перекиси бензоила и выбран режим термоотверждения ПГЭ.

Исходные полиэфирдиакрилаты в зависимости от условий получения имели различные характеристики. Поэтому был проведен поиск оптимальной методики синтеза ПЭДА на основании исследования электрохимических характеристик готовых ПГЭ методом импедансной спектроскопии. Объемная проводимость полученных гель-электролитов достигала  $4.3 \cdot 10^{-3}$  См/см при 20°C, что сопоставимо с проводимостью жидких электролитов. Также в ходе работы было оценено влияние крауноподобных структур на свойства системы Li/гель-электролит. Найдено, что энергия активации процесса переноса заряда Li<sup>+</sup> + e<sup>-</sup> <-> Li<sup>o</sup> в интервале температур от -18 до 10°C снижается в 2-3 раза вследствие адсорбции на литиевом электроде 1.6-диоксо-14-краун-4, способствующего десольватации иона Li<sup>+</sup>.



# ПОЛИМЕРНЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ КАТОДЫ ДЛЯ ЛИТИЕВЫХ ХИТ ПРЯМОГО КОНТАКТА

*Ковынева Н.Н.*

*СГТУ, Саратов, Россия*

*k.natasha\_86@bk.ru*

Применение электроактивных полимерных полупроводниковых композитов открывает широкие перспективы в создании нового поколения химических источников тока, главным преимуществом которых является возможность реализации пленочной технологии их изготовления методом непосредственного контакта катода и анода (так называемого «короткого замыкания»), исключая при этом один из основных модулей устройства – электролит.

Проведено исследование подобных систем, включающих Li-анод и катоды, выбранные из ряда полимерных композитов на основе термоструктурированного полиакрилонитрила (ПАН), включающих перхлораты, иодиды и станаты тиопирилия  $(\text{ТП1})_2\text{SnCl}_6$ ,  $(\text{ТП2})_2\text{SnCl}_6$ ,  $\text{ТП3ClO}_4$ ,  $\text{ТП3I}$ ,  $\text{ТП4ClO}_4$  с различной структурой радикалов.

При анализе продуктов катодных реакций методом импеданса в соответствии с моделью адсорбционный релаксации двойного слоя, возникающего на гетеропереходах металл – твердый электролит (продукт разряда), изменение заряда металлического электрода сопровождается адсорбцией как мобильных ионов твердого электролита, так и ионов жесткой решетки. Эта адсорбция протекает как медленный процесс, и контролируется диффузией точечных дефектов. При наложении переменного потенциала максимальные значения емкости и проводимости двойного слоя достигаются в двух случаях: при разупорядочении жесткой решетки электролита вдоль границ с полимером, а также вблизи порога разрыва матрицы электролита, когда полимер занимает большую часть объема [1].

Диапазон значений ионной проводимости продуктов катодной реакции лежит в интервале  $10^{-2}$ - $10^{-1}$  См·см<sup>-1</sup>. Полученные значения э.д.с. исследуемых систем лежат в интервале 2,7-3,2 В.

## Литература

- [1] Михайлова А.М., Ефанова В.В., Сигейкин Г.И., Ковынева Н.Н. // Тезисы докладов Всероссийской научной конференции «Технологии и материалы для экстремальных условий (применительно к химическим источникам тока)». Звенигород, 2010. с. 26-30.

# КОНДЕНСАТОР С ДВОЙНЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ СЛОЕМ НА ТВЕРДОМ ПОЛИМЕРНОМ ЭЛЕКТРОЛИТЕ

*Новожилов Е. П.*

*СГТУ, Саратов, Россия*

*nowogilowep2008@rambler.ru*

Электролитический конденсатор или конденсатор на двойном электрическом слое представляет собой вторичный источник тока, объединяющий в едином приборе свойства аккумулятора и электролитического конденсатора. В частности, обладая плотностью запасаемой энергии, близкой к аккумуляторам, в тоже время имеет электрические свойства (закономерности изменения емкости при последовательном соединении, симметричные токи заряда и разряда, возможность изменения рабочего напряжения в широком диапазоне, возможность глубокого разряда, большое количество циклов заряда и разряда), характерные для электролитических конденсаторов.

В связи с тем, что толщина двойного электрического слоя (то есть расстояние между «обкладкам конденсатора») очень мала, последние имеют большие ёмкости по сравнению с обычными конденсаторами того же размера. К тому же, использование двойного электрического слоя вместо обычного диэлектрика позволяет намного увеличить площадь поверхности электрода (например, путём использования пористых материалов, таких, как нанографит или вспененные металлы). Типичная ёмкость электролитического конденсатора – несколько фарад, при номинальном напряжении 2-10 В, ресурс составляет 500 тысяч циклов заряд – разряд.

Особый интерес представляют электролитические конденсаторы в которых в качестве электролита использованы вещества в твердой, а не в жидкой фазе так как они имеют целый ряд существенных преимуществ таких как: 1. Производство полимерных мембран дешево и экологически чисто; 2. Они имеют высокую электропроводность в широком интервале влажности и температурном диапазоне, химическую и механическую стабильность свойств, при работе в жёстких условиях; 3. Появляется возможность регулировки сопротивления толщиной мембраны, которая выполняет одновременно функции ионного проводника и сепаратора; 4. Гибкость без изменения свойств. ТПЭ состоящий из полимерной связующей основы (ПАН), и ионопроводящих солей (ССК, ФВК, ФМК,  $\text{LiClO}_4$ ) в различных концентрациях, с проводимостью по катионам и протонам. Пример исследования пленок с различным содержанием перхлората лития показывает, что возможно получить материал с удельной проводимостью, в пределах  $3 \cdot 10^{-3}$  до  $22 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$  при 298 К.

# ПРОТОНПРОВОДЯЩИЕ ГЕЛЬ-ЭЛЕКТРОЛИТЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА И БЕНЗОЛСУЛЬФОНОВЫХ КИСЛОТ

*\* Писарева А.В., Писарев Р.В., Добровольский Ю.А.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\* anyuta@icp.ac.ru*

Топливные элементы (ТЭ) на основе полимерных электролитов являются одними из наиболее привлекательных мощностных устройств в широкой области применения: от транспорта до портативных устройств, благодаря своему стабильному действию при относительно низких температурах, высокоэнергетическому выходу и простоте. Известная протонообменная мембрана Nafion<sup>®</sup> обладает подходящими физико-химическими свойствами для применения в ТЭ, но имеет три главных ограничения для ее использования: высокая цена, низкая проводимость при низкой влажности, высокая проницаемость метанола.

Настоящая работа посвящена исследованию протонной проводимости полимерных гель-электролитов на основе бензолсульфоновых кислот и поливинилового спирта (ПВС). Основной метод получения пленочных электролитов – метод полива смеси исходных компонентов на инертную подложку (тефлон) с последующим испарением растворителя при определенных значениях температуры и влажности. Выбор поливинилового спирта в качестве матрицы обусловлен низкой газопроницаемостью полимера, способностью макромолекул ПВС образовывать собственную систему Н-связей, а также возможностью образования эластичных пленок и гидрофильностью. Синтезированные полимерные гель-электролиты представляют собой прозрачные гибкие пленки. Показано, что протонная проводимость пленок достигает при увлажнении величины  $10^{-3}$ – $10^{-2}$  См•см<sup>-1</sup> при комнатной температуре. Эти значения сопоставимы с проводимостью не только жидких электролитов – растворов неорганических кислот, но и перфторированных протонообменных мембран Nafion<sup>®</sup>. Введение в полимерную матрицу органических сульфокислот позволило нам значительно расширить влажностный интервал измерения проводимости в отличие от индивидуальных образцов. Характер зависимости протонной проводимости от влажности сохраняется как при допировании кристаллическими бензолмоносульфо-кислотами и сульфобензойной кислотой, так и при допировании аморфными каликс[*n*]арен-пара-сульфо-кислотами (*n* = 4, 8) и поликрезуленом. В синтезированных гель-электролитах, по-видимому, формируются непрерывные сетки Н-связей Н<sub>2</sub>О–Н<sub>2</sub>О, сульфогруппы играют роль «якорей», к которым присоединяются молекулы Н<sub>2</sub>О.

# ПОЛУЧЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА ИЗ ВОДЫ ПОСРЕДСТВОМ НАНОПОРОШКОВ АЛЮМИНИЯ

*Пономарёва М.Ю.*

*ГОУ ВПО НИ ТПУ, Томский политехнический университет, ТПУ,  
Томск, Россия  
ponomarewamy@mail.ru*

В рамках создания компактных портативных источников тока, работающих на водороде, одним из наиболее удобных методов генерации водорода является окисление металлического алюминия водой [1]. В рамках данной работы изучается кинетика процесса синтеза водорода при низких температурах и концентрациях водного раствора NaOH.

В работе использовались пассивированные в воздухе нанопорошки алюминия (НПА), полученные методом электрического взрыва проводника (ЭВП), с размером частиц 50 и 100 нм. Известно, что алюминий плохо взаимодействует с водой за счет прочной оксидной пленки на поверхности частиц, поэтому в качестве активатора использовали раствор гидроксида натрия концентрацией 0.3 и 0.6 %. Кинетика процесса взаимодействия НПА с водопроводной водой изучалась в интервале температур 10-30°C с шагом 5°C с помощью волюметрического анализа.

Процесс при низких температурах характеризуется длинным индукционным периодом и протекает в кинетической области, переходя в диффузионную. С увеличением температуры скорость реакции увеличивается в 3 раза для порошков одной дисперсности. При низких температурах скорость реакции более высокая для мелких частиц. Степень превращения практически не зависит от температуры и составляет около 80%. При увеличении концентрации раствора NaOH индукционный период реакции сокращается, увеличивается скорость, а степень превращения остается неизменной.

## Литература

- [1] Пономарёва М.Ю., Строкова Ю.И., Громов А.А. Влияние температуры на скорость выделения молекулярного водорода при взаимодействии нанопорошка алюминия с водой // V Российская конференция «Физические проблемы водородной энергетики», Санкт-Петербург, 16-18 ноября 2009. С. 36-37.

# АМОΡФНЫЕ ТВЕРДЫЕ ЭЛЕКТРОЛИТЫ НА ОСНОВЕ $\text{Li}_2\text{O-LiF-P}_2\text{O}_5$ ДЛЯ ЛИТИЕВЫХ И ЛИТИЙ-ИОННЫХ ИСТОЧНИКОВ ТОКА

<sup>\*2</sup>Тронь А.В., <sup>1,2</sup>Шембель Е.М., <sup>2</sup>Максюта И.М.,

<sup>1</sup>Тутык В.А.

<sup>1</sup>*Enerize Corporation, Ft. Lauderdale, USA*, <sup>2</sup>*НИЛХИМ УГХТУ, Днепропетровск, Украина*

\*shembel@onil.dp.ua

Перспективность использования в литиевых источниках тока (ЛИТ) аморфных твердых электролитов (ТЭЛ) на основе оксидно-солевой системы  $\text{Li}_2\text{O-LiF-P}_2\text{O}_5$  показана в работе [1].

С целью обеспечить эффективное использование данных электролитов в ЛИТ в работе исследовано влияние химического состава ТЭЛ  $\text{Li}_2\text{O-LiF-P}_2\text{O}_5$  на ионную проводимость и энергию активации.

Показано, что введение в состав ТЭЛ иона фтора ( $\text{F}^-$ ) в виде фторида лития приводит к увеличению ионной проводимости до  $5.25 \cdot 10^{-6}$   $\text{См} \cdot \text{см}^{-1}$  при сохранении низкой электронной проводимости ( $2.09 \cdot 10^{-12}$   $\text{См} \cdot \text{см}^{-1}$  при  $24^\circ\text{C}$ ). В исходном состоянии ТЭЛ состава  $\text{Li}_2\text{O-LiF-P}_2\text{O}_5$  содержит структурные группы  $[\text{PO}_4]^{3-}$  и  $[\text{PO}_4\text{F}]^{4-}$ . Ионы лития ( $\text{Li}^+$ ) после внедрения в структуру могут локализоваться вблизи структурных групп  $[\text{PO}_4]^{3-}$  или  $[\text{PO}_4\text{F}]^{4-}$ , либо локализоваться вблизи ионов фтора ( $\text{F}^-$ ). Представлены данные, позволяющие описать механизм переноса катионов лития в твердой фазе данного электролита.

Разработанный ТЭЛ  $\text{Li}_2\text{O-LiF-P}_2\text{O}_5$  в диапазоне температур от  $24$  до  $106^\circ\text{C}$  обладает преимущественно ионным характером проводимости. Ионная проводимость ТЭЛ увеличилась от  $3.18 \cdot 10^{-7}$  до  $5.25 \cdot 10^{-6}$   $\text{См}/\text{см}$ . Энергия активации уменьшается от  $0.479$  эВ до  $0.336$  эВ. Это свидетельствует о некотором облегчении переноса ионов по ТЭЛ.

Разработан метод получения ТЭЛ состава  $\text{Li}_2\text{O-LiF-P}_2\text{O}_5$  методом вакуумного напыления в виде тонких пленок и исследовано влияние их параметров на характеристики межфазной границы ТЭЛ – электродный материал ЛИТ. Результаты данных исследований и разработок позволяют создать высокоэффективные тонкослойные литиевые и литий-ионные источники тока.

## Литература

- [1] Тронь А.В., Носенко А.В., Шембель Е.М. // Электрохимия. – 2009. – Т.45. – №5. – С.562-568.

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
СТРУКТУРЫ ПОЛИМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА  
ОСНОВЕ ПОЛИЭФИРДИАКРИЛАТА,  
ЭТИЛЕНКАРБОНАТА И LiClO<sub>4</sub>**

*\* Тулибаева Г.З., Хатмуллина К.Г.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия*

*\* tulibaeva@gmail.com*

Новые полимерные электролиты на основе полиэфирдиакрилата (ПЭДА), LiClO<sub>4</sub> и добавок этиленкарбоната (ЭК) имеют проводимость по ионам Li<sup>+</sup>, сопоставимую с проводимостью жидких электролитов. Но при увеличении содержания ЭК проводимость электролита сначала снижается на порядок величины при ~5 мас.% ЭК, а потом возрастает на 3 порядка при 55 мас.% ЭК. Для понимания природы этой экстремальной зависимости было проведено квантово-химическое изучение строения, энергии и колебательных частот смешанных комплексов Li<sup>+</sup> с ЭК и донорными группами (карбонильными и эфирными) полимерной цепи. При этом цепь ПЭДА моделировалась олигомером H-((CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>COO(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>-CH<sub>3</sub>, n ≤ 10. Изучение методом функционала плотности показало, что при малом содержании ЭК в смешанных комплексах с 1 молекулой ЭК возникает более прочное связывание иона лития с полимерной матрицей, которое приводит к снижению проводимости. С увеличением доли ЭК возникают более лабильные смешанные комплексы с 3 молекулами ЭК, которые при избытке ЭК становятся нестабильными относительно перехода ионов Li<sup>+</sup> в сольватные комплексы с участием только молекул ЭК.



# Авторский указатель

- Абдрахманов А.М., 63  
Абдршин А.Н., 118  
Абрамчук С.С., 165  
Авдеева Л.В., 202  
Авдин В.В., 119, 143  
Акимкин Т.М., 203  
Аксёнова А.А., 119  
Аладышев А.М., 48  
Александрова Н.А., 182  
Алексеева Н.А., 78  
Алентьев А.Ю., 178  
Алесенко А.В., 210, 216  
Алешин В.В., 74  
Алферов К.А., 92  
Ананьева М.В., 72, 75  
Андоралов В.М., 108  
Анимица И.Е., 148, 151  
Антипин В.А., 170  
Антонов А.Ю., 37, 120, 141, 144  
Антропова И.Г., 204  
Апостолова Р.Д., 134  
Артюхов В.Я., 34  
Асеев В.А., 44, 118, 139  
Астахов М.В., 132  
Ахмадеева Г.Х., 198  
Бабочкин К.А., 28, 80  
Багрянский В.А., 29  
Бадамшина Э.Р., 166, 169, 173  
Байкова И.С., 205  
Бакланов А.В., 102  
Бакланова И.В., 121  
Бакланова Я.В., 112  
Баскаков С.А., 62, 128  
Баскакова Ю.В., 62, 224  
Батуашвили М.Р., 160  
Батурина А.А., 57  
Беликов Н.Е., 187  
Белов Г.П., 92  
Белова К.Г., 148  
Белоненко М.Б., 149, 193  
Белоус А.И., 153  
Береговая И.В., 29  
Берестов А.С., 73  
Беседин С.П., 194  
Блинкова С.В., 29  
Блохина С.В., 212  
Богданов Г.Н., 47, 56, 207, 209,  
211  
Богданова Л.М., 224  
Богданова Ю.Г., 178  
Бодрова А.В., 74  
Боева О.А., 37, 120, 141, 144  
Бондарев В.Н., 54  
Борисенко Д.Н., 152  
Борисенко Е.Б., 152  
Борисов Р.С., 101  
Боровикова А.П., 72  
Бравая Н.М., 55  
Бревной П.Н., 172, 179  
Бричкин С.Б., 156, 187  
Бродова И.Г., 43  
Буданов Б.А., 183  
Буйко О.В., 184  
Буланова М.А., 122



- Булычев Б.М., 55  
Бурмакин Е.И., 133, 140  
Бурмистр М.В., 161  
Бурмистр О.М., 161  
Буянова Е.С., 129  
Бычкова А.В., 147, 185  
Вагапова Г.И., 30  
Вакарин С.В., 136  
Валеева Ф.Г., 30  
Валетдинов Д.А., 162  
Ванин А.Ф., 216  
Ванцян М.А., 194  
Варламов В.Т., 31, 93  
Васильева В.И., 115, 218  
Васильева Н.В., 123  
Ведерников А.И., 182, 192, 197  
Водянкина О.В., 126  
Воробьёва Е.А., 218  
Габдуллина А.И., 177  
Гагиева С.Ч., 55  
Гадомская А.В., 93  
Гадомский С.Я., 31  
Гайнанова Г.А., 30  
Галкина И.В., 30  
Ганцев Ш.Х., 198  
Гареев Б.М., 63  
Гвоздев Р.И., 202  
Гильман А.Б., 45, 160, 168  
Глазкова Н.И., 100  
Глазов С.В., 50  
Глебов Е.М., 46  
Голосова О.А., 124  
Голубев А.А., 28, 80  
Гольшев А.А., 125  
Гордосевич К.М., 186  
Горнакова А.С., 113  
Грачев В.П., 38, 57, 175  
Гребцова Е.А., 132  
Гривин В.П., 46, 110  
Грингольц М.Л., 178  
Гринев В.Г., 162, 179  
Гришаева Е.А., 72, 75  
Гришин М.В., 188  
Громов А.М., 98  
Громов С.П., 182, 192, 197  
Гудкова И.Ю., 73  
Гуренцов Е.В., 49  
Гутнева Е.С., 98  
Гырдасова О.И., 121, 135  
Далидчик Ф.И., 183  
Дементьев П.С., 32  
Демина О.В., 187  
Денисова Т.А., 112  
Джабиева З.М., 106, 109  
Джавадян Э.А., 224  
Джалмуханова А.С., 169  
Джардималиева Г.И., 157  
Дзюба С.А., 199  
Дидух С.Л., 191  
Дмитриев А.И., 36, 150, 155  
Дмитриева С.Н., 197  
Добровольский Ю.А., 227  
Докутович В.Н., 137  
Долгобородов А.Ю., 52  
Дорофеенко Е.М., 76  
Дорофеенко С.О., 64  
Дубникова И.Л., 162, 165  
Дубровский С.А., 147  
Дудин С.В., 28, 80  
Дунаев А.В., 79  
Евсеева Т.Г., 156  
Егоров Е.С., 77  
Епифанова А.А., 126  
Ефимов О.Н., 57, 224  
Ефремов А.М., 85, 88  
Жаворонкова К.Н., 144  
Жильцова Е.П., 195  
Жуков А.Н., 82, 89  
Жуковский В.М., 129  
Журавлева Т.С., 190, 214  
Журавский Н.А., 154  
Забалов М.В., 94  
Заболоцкая Е.В., 135  
Заводчикова А.А., 127

- Зайков Ю.П., 136  
Зайцев С.В., 150  
Заславский Г.Е., 33  
Захарова Л.Я., 30, 59, 189, 195  
Звездин К.В., 187  
Звеков А.А., 75, 84  
Зелепугин С.А., 158  
Зисман А.А., 124  
Зыков И.Ю., 84  
Зяблицкий С.А., 78  
Ибрагимова А.Р., 30, 189  
Иванов А.И., 58  
Иванов М.Б., 124  
Иванов Ю.А., 168  
Ивановская М.И., 116, 154  
Игнатъев А.И., 139  
Иорданский А.Л., 163  
Итулина А.Н., 69  
Кабачков Е.Н., 62  
Каданцева Н.В., 128  
Казаков Д.В., 51  
Казянова М.В., 95  
Кайгородова О.А., 121  
Каймиева О.С., 129  
Каленский А.В., 72, 75, 84  
Канцирев А.В., 80  
Канцырев А.В., 28  
Капинос С.П., 79  
Каргополова И.Ю., 123  
Карпов С.В., 96  
Карпова С.Г., 163  
Кашапов Р.Р., 195  
Кашапова Э.Р., 34  
Ким И.П., 167  
Кирман М.В., 155  
Кирсанкин А.А., 188  
Кислов В.М., 50, 81  
Кичигина А.О., 97  
Кленина Н.С., 163  
Клименко И.В., 190, 214  
Клямкина А.Н., 48  
Ковалев И.Д., 114  
Ковалевский В.И., 123  
Ковалевский С.А., 183  
Коварский А.Л., 147, 185  
Ковынева Н.Н., 225  
Когтенкова О.А., 130  
Козлова Н.Б., 205  
Козулин А.А., 131  
Колесников Н.Н., 152  
Колесников С.А., 28, 80  
Колесникова Н.Н., 177  
Колесникова Ю.Ю., 81  
Колобкова Е.В., 44, 118  
Колобов Ю.Р., 124, 132  
Комарова Н.С., 35  
Компанец В.О., 46  
Комратова В.В., 169  
Конов Д.Ю., 125  
Коновалихин С.В., 114  
Коновалов А.И., 195  
Коновалов А.С., 98  
Коновалова Н.П., 56  
Коплак О.В., 36  
Корж Н.Н., 164  
Корнев А.Б., 47, 207, 209, 211  
Коробенков М.В., 131  
Коробко Е.В., 154  
Коровина Н.А., 219  
Корчагин О.В., 99  
Костина Ю.В., 178  
Котельников А.И., 47, 56, 209,  
211  
Котельникова Р.А., 47, 56, 207,  
209, 211  
Котиков Д.А., 116, 154  
Кочетова Н.А., 148  
Крамор Р.В., 206  
Кранина Н.А., 115  
Красильников В.Н., 121, 135  
Крашенинников В.Г., 48, 162,  
165, 172, 179  
Кресова Е.И., 62  
Кривенко А.Г., 35, 68

Кригер В.Г., 72, 75, 84  
Крисюк Б.Э., 42, 67, 103  
Круговов Д.А., 210  
Круша А.И., 200  
Кувардина Е.В., 165  
Кудакина В.А., 82  
Кудинова О.И., 162  
Кудряшова Ю.Р., 189  
Кузнецов А.А., 45, 160, 174  
Кузнецов М.А., 37  
Кузнецов Ю.В., 214  
Кузьмина Л.Г., 192  
Кулагина Г.С., 166  
Кулик Л.В., 199  
Кульков С.С., 131  
Куница А.А., 167  
Курочкин С.А., 38, 175  
Лавров В.В., 28, 80  
Лагутина М.А., 147  
Лазебная М.А., 132  
Лаптев А.В., 187  
Лахно Е.И., 133  
Лебедев Н.Г., 66, 149, 193  
Лемперт Д.Б., 76, 83  
Леонова В.Б., 185  
Лешина Т.В., 200  
Лещинская К.В., 65  
Лисаченко А.А., 107  
Лобанов А.В., 190  
Лобова Н.А., 182, 197  
Лодыгина В.П., 169  
Ломакин С.М., 165  
Лосев В.Н., 184, 191  
Луканина Ю.К., 177, 206  
Лукашенко С.С., 195  
Лукин А.Ю., 187  
Луценко Н.А., 39  
Лыго О.Н., 40  
Ляпкосова О.С., 66  
Магаев О.В., 126  
Магомедов Р.Н., 41  
Мазалецкая Л.И., 206  
Майер Г.В., 34  
Майоров А.В., 42, 67, 103  
Макеев М.О., 168  
Максимов А.И., 70, 86  
Максимова Л.Г., 112  
Максюта И.М., 229  
Малков Г.В., 96, 169  
Малыхин М.Д., 115  
Мамин Э.А., 67  
Мамыкин Д.А., 170  
Манелис Г.Б., 33  
Манжос Р.А., 68  
Манохин С.С., 124  
Маракулина К.М., 206  
Маркевич А.В., 134  
Мартыненко В.М., 62  
Масалов В.М., 53  
Масягутова Г.А., 69  
Матюшенко Д.В., 125  
Махаев В.Д., 55  
Махов М.Н., 52  
Махонина Л.И., 38  
Мелкозерова М.А., 135  
Мельников А.А., 46  
Меляева А.А., 136  
Меньшикова А.Ю., 156  
Метелица С.И., 191  
Мешков С.А., 168  
Микоян В.Д., 216  
Минцев В.Б., 28, 80  
Миргородская А.Б., 59  
Мисин В.М., 214  
Михайлов Р.В., 100, 107  
Михайлов Ю.М., 74  
Михайлова В.А., 58, 95  
Михайлова З.А., 83  
Мищенко Д.В., 56, 207, 209, 211  
Моденов Д.В., 137  
Молодец А.М., 125  
Монахова Т.В., 48  
Моргунов Р.Б., 36, 150, 155  
Моцарь А.С., 171

- Мурадян В.Е., 48, 62, 128  
Мухамадиева С.Р., 69  
Мясниченко В.С., 138  
Назирова О.Д., 172, 179  
Насонов П.А., 43  
Неврова О.В., 190  
Недорезова П.М., 48  
Недосекин Ю.В., 115  
Ней В.Т., 101  
Некипелова Т.Д., 40  
Некрасова Я.А., 44, 139  
Нечаев Г.В., 140  
Нешев Н.И., 212  
Низовцев А.С., 102  
Никитин А.П., 84  
Никифоров А.С., 192  
Николаев Д.Н., 28  
Николенко Д.Ю., 156, 187  
Никоноров Н.В., 44, 118, 139  
Новикова З.А., 154  
Новожилов Е.П., 226  
Новокшенова Л.А., 162, 165, 172,  
176, 179  
Нуртдинова К.Ф., 120, 141  
Оводок Е.А., 116  
Овчинников В.А., 103  
Ольхова О.М., 166, 173  
Орлова Н.А., 123  
Остахов С.С., 198  
Пак А.В., 193  
Паладичева А.В., 194  
Пальмина Н.П., 215  
Панкратов А.А., 136  
Панченко Н.Ф., 78  
Паньков В.В., 154  
Паширова Т.Н., 195  
Певченко Б.В., 78, 98  
Переляева Л.А., 121  
Перепелицина Е.О., 38, 175  
Петров Л.В., 104  
Петрова А.Н., 43  
Петрова Л.А., 55  
Петрова Т.А., 104  
Пивоваренок С.А., 79  
Писарев Р.В., 227  
Писарев С.А., 166  
Писарева А.В., 227  
Пискарев М.С., 45, 160  
Пичугина Т.И., 199  
Плаксин С.В., 133, 136  
Плюснин В.Ф., 46, 110  
Поздняков И.П., 46, 110  
Покидько Б.В., 172  
Поклад С.В., 173  
Полетаева Д.А., 47, 56, 207, 211  
Польщиков С.В., 48  
Помогайло А.Д., 157  
Пономарёва М.Ю., 228  
Попов А.А., 42, 67, 103, 164, 177  
Попова Г.В., 186  
Приемченко К.Ю., 49  
Промахов В.В., 142  
Пронкин П.Г., 196  
Прошина А.Ю., 41  
Психа Б.Л., 104, 212  
Пьи Пьо Аунг, 208, 213  
Рахметов А.Н., 220  
Ревина А.А., 37, 120, 141, 144,  
204  
Ризванов И.Х., 30  
Рогачёва А.И., 82  
Рогозина М.В., 105  
Розенфельд М.А., 185  
Розенцвет В.А., 219  
Романов А.О., 30  
Романова В.С., 56, 207  
Рошан Н.Р., 65  
Руднева Т.Н., 212  
Рыбкин А.Ю., 47, 207, 209, 211  
Рыжкова О.В., 210  
Савин И.В., 197  
Савченко А.В., 28, 80  
Салганская М.В., 50  
Салганский Е.А., 50, 81

Самойлов В.О., 101  
 Самуйлов Е.В., 87  
 Санина Н.А., 212  
 Саратовских Е.А., 205  
 Сафаров Ф.Э., 51  
 Сафонов В.А., 68  
 Сафонова Т.В., 143  
 Сафронов Н.Е., 52  
 Свердликовская О.С., 161  
 Светцов В.И., 85, 88  
 Свидченко Е.А., 174  
 Семенова Г.К., 174  
 Семенова О.А., 85  
 Семерикова О.Л., 136  
 Сергеев М.О., 37, 120, 141, 144  
 Сиган А.Л., 174  
 Силантьев М.А., 175  
 Силкин С.В., 70  
 Синевич Е.А., 179  
 Сирота Е.А., 115  
 Скрипняк В.В., 131, 145  
 Скрипняк Н.В., 146  
 Смирнов В.А., 62  
 Смирнов Г.Н., 28, 80  
 Смолина А.В., 47, 207, 209, 211  
 Соколова Е.М., 212  
 Соляников В.М., 104  
 Сорокина О.Н., 147, 185  
 Спесивцева И.В., 148  
 Старостенков М.Д., 138  
 Старчак Е.Е., 176  
 Страумал Б.Б., 130  
 Стрелецкий А.Н., 52  
 Суглобова И.К., 158  
 Судоргин С.А., 149  
 Султанбаев М.В., 198  
 Сульtimoва Н.Б., 196  
 Сурин Н.М., 174  
 Суханов Г.Т., 78  
 Сухинина Н.С., 53  
 Сякаев В.В., 30  
 Таланцев А.Д., 150  
 Таракина Н.В., 112  
 Тарасевич Д.В., 54  
 Тарасов А.Е., 173  
 Тарасова Н.А., 151  
 Тарасова О.А., 129  
 Татиколов А.С., 196, 203  
 Темнова М.Л., 106  
 Терновой В.Я., 28  
 Тигер Р.П., 94  
 Тимонина А.В., 152  
 Тимохина Е.Н., 40  
 Титов В.В., 107  
 Тихонов А.П., 186  
 Трипачев О.В., 108  
 Тронь А.В., 229  
 Трошин А.П., 47  
 Трошин П.А., 207, 209, 211  
 Тудрий Е.В., 30  
 Тулибаева Г.З., 230  
 Туртиков В.И., 28, 80  
 Турцевич А.С., 153  
 Тускаев В.А., 55  
 Тутык В.А., 229  
 Тухватуллин И.А., 202  
 Уваров М.Н., 199  
 Уткин А.В., 28, 80, 89  
 Ушаков Е.Н., 197  
 Ушакова Т.М., 176  
 Ушеренко Ю.С., 153  
 Файнгольд Е.Е., 55  
 Файнгольд И.И., 47, 56, 207,  
 211  
 Фенин А.А., 208, 213  
 Филинкова Я.В., 151  
 Филиппова К.Н., 214  
 Филиппович Е.А., 154  
 Финкельштейн Е.Ш., 178  
 Фокин И.Г., 221  
 Фомина М.В., 192  
 Фортов В.Е., 28  
 Фрог Е.С., 56  
 Хакина Е.А., 47, 207, 209, 211

Хатмуллина К.Г., 57, 230  
Хватов А.В., 177  
Хлюстова А.В., 70, 86  
Ходонов А.А., 187  
Хорев М.С., 86  
Хохлов В.А., 137  
Храмов Г.В., 132  
Хурсан С.Л., 198  
Цветкова Д.С., 178  
Чалых А.Е., 166  
Часовская Т.Е., 215  
Чекалин С.В., 46  
Черненькая А.С., 155  
Чжо Зин Хтут ., 204  
Чистов Е.М., 65  
Чмутин И.А., 162, 179  
Чоба М.А., 68  
Чуканова О.М., 92  
Шапиро А.Б., 185  
Шапка В.Х., 161  
Шаповалова О.В., 220  
Шарипов Г.Л., 63  
Шарков Б.Ю., 28  
Шарпатый В.А., 208, 213  
Шатохина А.Н., 129  
Шафеев Р.В., 79  
Шведов С.В., 153  
Шведова Л.А., 196  
Швец В.И., 187  
Шевченко В.Г., 48  
Шевченко Н.Н., 156  
Шелковников В.В., 123  
Шелудченко Н.И., 206  
Шембель Е.М., 134, 229  
Шершнева В.А., 163  
Шершнёв В.А., 157  
Шестаков А.Ф., 167  
Шестов Л.М., 28, 80  
Шехтман Г.Ш., 133, 140  
Шибряева Л.С., 164  
Шилкин Н.С., 28  
Шипачев А.Н., 158  
Ширинкина И.Г., 43  
Шишкина В.П., 177  
Шишкина Л.Н., 206  
Шлотгауэр А.А., 200  
Шматко Н.Ю., 109  
Шмельков Ю.Б., 87  
Шорохов Е.В., 43  
Штамм Е.В., 205  
Шуб Б.Р., 188  
Шубина П.А., 213  
Шуленина А.В., 194  
Шульга Ю.М., 62, 125  
Шупик М.А., 216  
Щапин И.Ю., 101  
Щеголева Л.Н., 29  
Щеголихин А.Н., 48  
Щербакова Е.В., 95  
Щербина М.А., 172  
Эстрин Я.И., 173  
Юданов В.В., 58  
Юдина А.В., 88  
Юркова М.П., 110  
Юрьев Д.С., 28  
Юхаева Г.Р., 179  
Яблоков М.Ю., 45, 160, 168  
Якушев В.В., 28, 82, 89  
Ярмоленко О.В., 57, 224  
Ярмолюк С.М., 203  
Яцкевич Е.И., 59

## Список организаций

*АлтГТУ* — Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова  
*БГУ* — Белорусский государственный университет  
*БелГУ* — Белгородский государственный университет  
*ВГУ* — Воронежский государственный университет  
*ВлГУ* — Владимирский государственный университет  
*ВолГТУ* — Волгоградский государственный технический университет  
*ВолГУ* — Волгоградский государственный университет  
*ВятГУ* — Вятский государственный университет  
*ГГНИ* — Грозненский государственный нефтяной институт имени академика М.Д. Миллионщикова  
*ГОУ ВПО МУПОЧ* — Международный университет природы, общества и человека «Дубна»  
*ГУ НИИЦ «Кристалл»* — Государственное учреждение «Научно-исследовательский инженерный центр «Кристалл»  
*ДАР/ВОДГЕО* — ЗАО «ДАР/ВОДГЕО»  
*ИАП РАН* — Институт аналитического приборостроения РАН  
*ИАПУ ДВО РАН* — Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН  
*ИБХФ РАН* — Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН  
*ИвГУ* — Ивановский государственный университет  
*ИВС РАН* — Институт высокомолекулярных соединений РАН  
*ИВТЭ УрО РАН* — Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН  
*ИГУ* — Иркутский государственный университет  
*ИГХТУ* — Ивановский государственный химико-технологический университет  
*ИКАН* — Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН  
*ИК СО РАН* — Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН  
*ИМЕТ РАН* — Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН  
*Имет УрО РАН* — Институт металлургии УрО РАН  
*ИМХ РАН* — Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН  
*ИНК РАН* — Институт нефтехимии и катализа РАН  
*ИНХ СО РАН* — Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН  
*ИНХС РАН* — Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН  
*ИНЭОС РАН* — Институт элементоорганических соединений им. А.Н.

Несмеянова РАН  
*ИОНХ РАН* — Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН  
*ИОС УрО РАН* — Институт органического синтеза имени И.Я. Постовского УрО РАН  
*ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН* — Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова РАН  
*ИОХ РАН* — Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН  
*ИОХ УНЦ РАН* — Институт органической химии УНЦ РАН  
*ИПНГ СО РАН* — Институт проблем нефти и газа СО РАН  
*ИППУ СО РАН* — Институт проблем переработки углеводов СО РАН  
*ИПТМ РАН* — Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН  
*ИПХФ РАН* — Институт проблем химической физики РАН  
*ИПХЭТ СО РАН* — Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН  
*ИрИХ СО РАН* — Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН  
*ИСМАН* — Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН  
*ИСПМ РАН* — Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН  
*ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН* — Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН  
*ИТХ УрО РАН* — Институт технической химии УрО РАН  
*ИУХМ СО РАН* — Институт углехимии и химического материаловедения СО РАН  
*ИФАВ РАН* — Институт физиологически активных веществ РАН  
*ИФВД РАН* — Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН  
*ИФП РАН* — Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН  
*ИФПМ СО РАН* — Институт физики прочности и материаловедения СО РАН  
*ИФТТ РАН* — Институт физики твердого тела РАН  
*ИФХЭ РАН* — Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН  
*ИХ ДВО РАН* — Институт химии ДВО РАН  
*ИХВВ РАН* — Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН  
*ИХКГ СО РАН* — Институт химической кинетики и горения СО РАН  
*ИХ Коми НЦ УрО РАН* — Институт химии Коми НЦ УрО РАН



*ИХН СО РАН* — Институт химии нефти СО РАН  
*ИХР РАН* — Институт химии растворов РАН  
*ИХС РАН* — Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН  
*ИХТТМ СО РАН* — Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН  
*ИХТТ УрО РАН* — Институт химии твердого тела УрО РАН  
*ИХФ РАН* — Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН  
*ИХХТ СО РАН* — Институт химии и химической технологии СО РАН  
*КГТУ* — Казанский государственный технологический университет  
*КГТУ-КАИ* — Казанский государственный технический университет им. А.Н. Туполева  
*КемГУ* — Кемеровский государственный университет  
*КубГУ* — Кубанский государственный университет  
*КурскГУ* — Курский государственный университет  
*КФТИ КазНЦ РАН* — Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского КазНЦ РАН  
*КФУ* — Казанский (Приволжский) федеральный университет  
*ЛГПУ* — Липецкий государственный педагогический университет  
*ЛГТУ* — Липецкий государственный технический университет  
*МАДИ* — Московский автомобильно-дорожный институт  
*МАИ* — Московский авиационный институт  
*МарГУ* — Марийский государственный университет  
*МГТУ им. Н.Э. Баумана* — Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана  
*МГУ им. М.В. Ломоносова* — Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова  
*МГУ им. Н.П. Огарева* — Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева  
*МИСИС* — Московский государственный институт стали и сплавов  
*МИТХТ им. М.В. Ломоносова* — Московская государственная академия тонкой химической технологии имени М.В. Ломоносова  
*МТЦ СО РАН* — Институт «Международный томографический центр» СО РАН  
*МФТИ* — Московский физико-технический институт  
*НГУ* — Новосибирский государственный университет  
*НИИ физики ОНУ им. И.И. Мечникова* — НИИ физики Одесского национального университета им. И.И. Мечникова  
*НИЛХИТ УГХТУ* — Научно-исследовательская лаборатория химических источников тока Украинского государственного химико-технологического университета  
*НПОХ СО РАН* — Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН

*НИЯУ МИФИ* — Московский инженерно-физический институт  
*ННГУ им. Н.И. Лобачевского* — Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского  
*НовГУ* — Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого  
*ОИВТ РАН* — Объединенный институт высоких температур РАН  
*ПГТУ* — Пермский государственный технический университет  
*ПГУ* — Пермский государственный университет  
*РГУ нефти и газа имени И.М. Губкина* — Российский государственный университет нефти и газа имени И.М. Губкина  
*РФЯЦ ВНИИТФ* — ФГУП «Российский федеральный ядерный центр - Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. ак. Е.И. Забабахина»  
*РХТУ им. Д.И. Менделеева* — Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева  
*СамГТУ* — Самарский государственный технический университет  
*СамГУ* — Самарский государственный университет  
*СГТУ* — Саратовский государственный технический университет  
*СГУ им. Н.Г. Чернышевского* — Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского  
*СибГТУ* — Сибирский государственный технологический университет  
*СПбГТИ* — Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
*СПбГТУ* — Санкт-Петербургский государственный политехнический университет  
*СПбГУ* — Санкт-Петербургский государственный университет  
*СПбГУ ИТМО* — Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий механики и оптики  
*СФУ* — Сибирский федеральный университет  
*ТвГУ* — Тверской государственный университет  
*ТГТУ* — Тверской государственный технический университет  
*ТГУ* — Томский государственный университет  
*ТПУ* — Томский политехнический университет  
*ТулГУ* — Тульский государственный университет  
*УГХТУ* — Украинский государственный химико-технологический университет  
*УНЦ «ФХМ» КНУ им. Т.Шевченко и НАНУ* — УНЦ "Физико-химическое материаловедение" Киевского национального университета им. Тараса Шевченко и НАН Украины  
*УрГУ* — Уральский государственный университет им. А.М. Горького  
*УрФУ им. первого Президента России Б.Н. Ельцина* — Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

цина

*ФИАН* — Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

*Филиал ФГУП «НИФХИ им. Л.Я. Карпова»* — Филиал ФГУП «Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л.Я. Карпова»

*ФНПЦ «Алтай»* — ОАО «Федеральный научно-производственный центр «Алтай»

*ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН* — Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

*ЦФ РАН* — Центр фотохимии РАН

*ЧГУ* — Чеченский государственный университет

*ЧувГУ* — Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова

*ЭНИИ* — ОАО «Энергетический институт им. Г.М. Кржижановского»

*ЮЗГУ* — Юго-Западный государственный университет

*ЮУрГУ* — Южно-Уральский государственный университет

*ЮФУ* — Южный федеральный университет

*ЯГТУ* — Ярославский государственный технический университет

*ЯрГУ* — Ярославский государственный университет имени П.Г. Демидова

## Список зарегистрированных участников

1. *Абдршин Альберт Наильевич*, СПбГУ ИТМО, пр. Кронверкский, д.49, Санкт-Петербург, Россия, 197101, тел: +7 (911) 008-36-28,  
Email myltitabs@mail.ru
2. *Авдеева Лидия Владимировна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: (49652)21387,  
Email tuman@cat.icp.ac.ru
3. *Акимкин Тимофей Михайлович*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: (495) 9397171,  
Email: aki.tim@gmail.com
4. *Аксенова Юлия Викторовна*, ТГУ, ул. Ленина, д. 36, Томск, Россия, 634050, тел: (3822) 533426,  
Email juliya1711@rambler.ru
5. *Аксёнова Анна Алексеевна*, НИУ ГОУ ВПО ЮУрГУ, роспект им. В. И. Ленина, 76, Челябинск, Россия, 454080, тел: +79507431217, факс: +7(351)2679917,  
Email anechka1408@mail.ru
6. *Александрова Надежда Александровна*, ЦФ РАН, ул. Новаторов, д. 7а, корп.1, Москва, Россия, 119421, тел: (495)9361255,  
Email: 11aha11@rambler.ru
7. *Алферов Кирилл Александрович*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 84965225065,  
Email kirill-alpherov@yandex.ru
8. *Ананьева Марина Владимировна*, КемГУ, ул. Красная, д. 6, Кемерово, Россия, 650043, тел: (3842)580591,  
Email: zvekova@gmail.com
9. *Андрушкевич Виктория Андреевна*, ИМЕТ РАН, Ленинский просп., д. 49, Москва, Россия, 119991, тел: 89629614788,  
Email: azwsxedc-87@mail.ru
10. *Антонов Алексей Юрьевич*, РХТУ им. Д.И. Менделеева, Миусская пл., д. 9, Москва, Россия, 125047, тел: 89057452632,  
Email: zest-alant@mail.ru
11. *Антропова Ирина Геннадьевна*, РХТУ им. Д.И. Менделеева, Миусская пл., д. 9, Москва, Россия, 125047, тел: 8(495)9485464,

- 8(903)7093682, факс: 8(495)9441987,  
Email antropovai@inbox.ru
12. *Арсентьев Максим Юрьевич*, ИХС РАН, наб. Макарова, д. 2, Санкт-Петербург, Россия, 199034, тел: (812) 328-85-93,  
Email: tikhonov\_p-a@mail.ru
  13. *Асеев Владимир Анатольевич*, СПбГУ ИТМО, пр. Кронверкский, д.49, Санкт-Петербург, Россия, 197101, тел: 8(812)3376883,  
Email Aseev@oi.ifmo.ru
  14. *Аунг Пьи Пьо*, РХТУ им. Д.И. Менделеева, Миусская пл., д. 9, Москва, Россия, 125047, тел: (495)9485464,  
Email fmkfenin@bk.ru
  15. *Бабочкин Кирилл Александрович*, МФТИ, Институтский переулок, 9, Долгопрудный, Россия, 141700, тел: 8-916-148-19-10,  
Email bball@inbox.ru
  16. *Байкова Ида Сергеевна*, ДАР/ВОДГЕО, Большой Саввинский пер., д. 9, стр. 1, Москва, Россия, 119435, тел: 8-926-720-39-47,  
Email ida13@mail.ru
  17. *Бакланова Инна Викторовна*, ИХТТ УрО РАН, ул. Первомайская, д. 91, Екатеринбург, Россия, 620041, тел: (343)3623387, факс: (343)3744495,  
Email baklanova\_i@ihim.uran.ru
  18. *Бакланова Яна Викторовна*, ИХТТ УрО РАН, ул. Первомайская, д. 91, Екатеринбург, Россия, 620041, тел: (343)3623529,  
Email: baklanovay@ihim.uran.ru
  19. *Баскаков Сергей Алексеевич*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8(49652)22596,  
Email baskakov@icrp.ac.ru
  20. *Баскакова Юлия Владимировна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8(49652)22596,  
Email yuvl@icrp.ac.ru
  21. *Батуашвили Мария Рузиковна*, ИСПМ РАН, ул. Профсоюзная, 70, Москва, Россия, 117393, тел: (495) 332-5865, факс: (495) 718-3404,  
Email masha-bat@yandex.ru

22. *Берестов Андрей Сергеевич*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семёнова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: +7-926-414-30-64, Email enzo.msu@gmail.com
23. *Блинкова Светлана Владимировна*, ИХКГ СО РАН, ул. Институтская, д. 3, Новосибирск, Россия, 630090, тел: 8-383-333-15-61, Email blinkova@kinetics.nsc.ru
24. *Бодрова Анастасия Валериевна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семёнова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: +79167163218, Email bodrova\_87@mail.ru
25. *Бревнов Петр Николаевич*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 8-910-467-49-55, Email: pbrevnov@chph.ras.ru
26. *Буданов Борис Андреевич*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 8-963-674-11-70, Email budanov.b@gmail.com
27. *Буйко Ольга Васильевна*, СФУ, просп. Свободный, д. 79, Красноярск, Россия, 660041, тел: +79232833327, Email: bujko\_olga@mail.ru
28. *Буланова Мария Андреевна*, ГОУ ВПО МУПОЧ, Московская область, г.Дубна, ул. Университетская д.19 кафедра химии, Дубна, Россия, 141980, тел: 8(496)2190747, факс: 8(496)2190747, Email: ya-zaichonok@mail.ru
29. *Бурмистр Ольга Михайловна*, УГХТУ, пр. Гагарина, 8, Днепропетровск, Украина, 4900, тел: 0562473316, Email: Olylyna@rambler.ru
30. *Бычкова Анна Владимировна*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: 8(495)939-7366, Email: annb0005@yandex.ru
31. *Вагапова Гузалия Ильгизовна*, ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, ул. Академика Арбузова, д. 8, Казань, Россия, 420088, тел: 89274422114, Email rain2114@yandex.ru
32. *Валетдинов Дамир Ахатович*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 939-7373, Email: damirkaulymka@mail.ru

33. *Варфоломеева Татьяна Николаевна*, ИФАВ РАН, Северный проезд, д. 1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 89271123265, Email: Juli4211@mail.ru
34. *Васильев Александр Витальевич*, МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, Москва, Россия, 119992, тел: (495) 939-34-40, Email a.vasiliev@inorg.chem.msu.ru
35. *Васильева Надежда Викторовна*, НИОХ СО РАН, просп. Ак. Лаврентьева, д. 9, Новосибирск, Россия, 630090, тел: 89059563859, Email nadya85@ngs.ru
36. *Вертий Анна Андреевна*, НИУ ГОУ ВПО ЮУрГУ, проспект им. В. И. Ленина, 76, Челябинск, Россия, 454080, тел: +7982315779, факс: +7(351)2679917, Email bo0ka@list.ru
37. *Воробьева Елена Алексеевна*, ВГУ, ул. Университетская пл., д. 1, Воронеж, Россия, 394006, тел: 89155460174, Email: vorobjeva\_ea@mail.ru
38. *Гадомская Анна Владимировна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: +7-496-522-78-89, Email ann.gadomsky@gmail.com
39. *Гадомский Святослав Ярославович*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: +7-496-522-78-89, Email gadomsky@rambler.ru
40. *Гареев Булат Махмутович*, ИНК РАН, просп. Октября, д. 141, Уфа, Россия, 450075, тел: +7(347)2312750 моб: +79899569202, Email gareev-bulat@yandex.ru
41. *Головоцесова Олеся Ивановна*, ИОХ УНЦ РАН, проспект Октября, 71, Уфа, Россия, 450054, тел: 8-917-453-60-58, 8-(347)235-55-60, Email puzin@anrb.ru
42. *Голосова Ольга Александровна*, БелГУ, ул. Победы, д. 85, Белгород, Россия, 308015, тел: +7 (4722) 585408, Email: golosova@bsu.edu.ru
43. *Гольшев Андрей Анатольевич*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: +7(496)5227225, факс: +7(496)5221049, Email golyshev@icp.ac.ru

44. *Гордосевич Кирилл Михайлович*, РХТУ им. Д.И. Менделеева, Миусская пл., д. 9, Москва, Россия, 125047, тел: (499) 978-87-30, факс: (495) 609-29-64,  
Email tikhon@muctr.ru, galina@muctr.ru
45. *Горнакова Алена Сергеевна*, ИФТТ РАН, Институтская ул., д. 2, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8 (49652) 22957,  
Email: alenahas@issp.ac.ru
46. *Гришаева Елена Александровна*, КемГУ, ул. Красная, д. 6, Кемерово, Россия, 650043, тел: (3842)580591,  
Email gula87@yandex.ru
47. *Давлятишина Алена Андреевна*, ИГХТУ, просп. Ф. Энгельса, д. 7, Иваново, Россия, 153000, тел: 89611156161,  
Email: m\_argalik@mail.ru
48. *Дементьев Пётр Сергеевич*, ИХКГ СО РАН, ул. Институтская, д. 3, Новосибирск, Россия, 630090, тел: +73833332944,  
Email: dementyev@kinetics.nsc.ru
49. *Демина Татьяна Сергеевна*, ИСПМ РАН, ул. Профсоюзная, 70, Москва, Россия, 117393, тел: (495)3325873,  
Email: detans@gmail.com
50. *Дмитриев Алексей Иванович*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8(49652)25134,  
Email aid@icp.ac.ru
51. *Дорофеевко Сергей Олегович*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 2-13-18,  
Email: dorofeenko@icp.ac.ru
52. *Дорофеевко Екатерина Михайловна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 2-19-13,  
Email emdor@list.ru
53. *Егоров Евгений Сергеевич*, МФТИ, Институтский переулок, 9, Долгопрудный, Россия, 141700, тел: 89268188059,  
Email: geniaegorov@mail.ru
54. *Емельянов Константин Борисович*, МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, Москва, Россия, 119992, тел: +7 926 3930980,  
Email kostya.emelyanov@gmail.com



55. *Епифанова Анастасия Александровна*, ТГУ, ул. Ленина, д. 36, Томск, Россия, 634050, тел: 8-923-415-66,  
Email: epifanova@mail.ru
56. *Ермолина Елена Геннадьевна*, ТГУ, ул. Ленина, д. 36, Томск, Россия, 634050, тел: 8(3822)533426, 89069554065,  
Email: yaskolka@inbox.ru
57. *Желтякова Ирина Сергеевна*, ИФТТ РАН, Институтская ул., д. 2, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 25398,  
Email: terekhova@issp.ac.ru
58. *Забалов Максим Вячеславович*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 314-90-76,  
Email zabalov@mail.ru
59. *Заводчикова Анна Алексеевна*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 939-73-14,  
Email ivb@chph.ras.ru
60. *Зайцев Кирилл Владимирович*, МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, Москва, Россия, 119992, тел: 84959393887,  
Email: zvkir@mail.ru
61. *Заславский Глеб Евгеньевич*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семёнова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 89636948956,  
Email: zaslavskyge@gmail.com
62. *Звездин Константин Викторович*, МИТХТ им. М.В. Ломоносова, просп. Вернадского, д. 86, Москва, Россия, 119571, тел: +79262834094,  
Email kzvezdin@yahoo.com
63. *Зыков Игорь Юрьевич*, КемГУ, ул. Красная, д. 6, Кемерово, Россия, 650043, тел: 89516166744,  
Email kriger@kemsu.ru
64. *Зяблицкий Сергей Анатольевич*, ОАО «ФНПЦ «Алтай», ул. Социалистическая, 1, Бийск, Россия, 659322, тел: 3854 301703, факс: 3854 311309,  
Email post@frpc.secna.ru
65. *Игнатова Нина Юрьевна*, СФУ, просп. Свободный, д. 79, Красноярск, Россия, 660041, тел: 89131940653,  
Email ninaiphc@gmail.com

66. *Каданцева Нина Владимировна*, МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, Москва, Россия, 119992, тел: 8(49652)22596,  
Email: sabaskakov@gmail.com
67. *Казянова Маргарита Владимировна*, ВолГУ, просп. Университетский, д. 100, Волгоград, Россия, 400062, тел: 89275072093,  
Email margarit\_ka.k@mail.ru
68. *Каймиева Ольга Сергеевна*, УрГУ, пр. Ленина, 51, Екатеринбург, Россия, 620000, тел: 89068078901,  
Email hn1986@mail.ru
69. *Калюканов Андрей Игоревич*, Филиал ФГУП «НИФХИ им. Л.Я. Карпова», Киевское шоссе 109 км, Обнинск, Россия, 249033, тел: 89158963301,  
Email iate\_kot@mail.ru
70. *Капинос Сергей Павлович*, ИГХТУ, просп. Ф. Энгельса, д. 7, Иваново, Россия, 153000, тел: 8 905 109 00 76,  
Email d-tritus04@mail.ru; dunaev-80@mail.ru
71. *Карпов Сергей Витальевич*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семёнова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 89671628496,  
Email: karpov\_s.v@mail.ru
72. *Кашапова Эльвира Рамисовна*, ТГУ, ул. Ленина, д. 36, Томск, Россия, 634050, тел: (382-2) 53-34-26, факс: (382-2) 53-30-34,  
Email ekasharova@rambler.ru
73. *Киреенко Марина Михайловна*, МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, Москва, Россия, 119992, тел: 84959393887,  
Email: marinakireenko@rambler.ru
74. *Кирсанкин Андрей Александрович*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 89067570661,  
Email kirsankin@mail.ru
75. *Киселёв Михаил Сергеевич*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семёнова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 89061274516,  
Email: kms726@yandex.ru
76. *Кичигина Анна Олеговна*, ВолГУ, просп. Университетский, д. 100, Волгоград, Россия, 400062, тел: 8442(46-08-11),  
Email: annakichigina@yandex.ru

77. *Кленина Наталья Сергеевна*, МИТХТ им. М.В. Ломоносова, просп. Вернадского, д. 86, Москва, Россия, 119571, тел: 89262584823, Email kleonik@mail.ru
78. *Ковалев Иван Дмитриевич*, ИСМАН, ул. Институтская, д. 8, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 46-370, Email i2212@yandex.ru
79. *Ковыньёва Наталья Николаевна*, СГТУ, ул. Политехническая, 77, Саратов, Россия, 410054, тел: 89518822925, Email: K.natasha\_86@bk.ru
80. *Когтенкова Ольга Александровна*, ИФТТ РАН, Институтская ул., д. 2, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8-496-52-2-29-57, Email koololga@issp.ac.ru
81. *Колесников Сергей Александрович*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: +7(49652)24125, факс: +7(49652)24125, Email ksa@icp.ac.ru
82. *Колесникова Юлия Юрьевна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 89032781079, Email: colesnikowa.iulya@yandex.ru
83. *Комарова Наталья Семеновна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: +7(496)5221404, факс: (496)5223507, Email komarova@icp.ac.ru
84. *Кондаков Александр Александрович*, ИСМАН, ул. Институтская, д. 8, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 89250406705, Email: kondakov\_aleks@list.ru
85. *Коновалов Антон Станиславович*, ОАО «ФНПЦ «Алтай», ул. Социалистическая, 1, Бийск, Россия, 659322, тел: 83854301530, Email AScorp412@yandex.ru
86. *Коплак Оксана Вячеславовна*, УНЦ "Физико-химическое материаловедение" КНУ им. Т. Шевченко и НАНУ, ул. Владимирская, д. 64, Киев, Украина, 01033, тел: 89150376014, Email: o.koplak@gmail.com
87. *Корж Николай Николаевич*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: 8(495)9397186, Email: korzh1977@rambler.ru

88. *Коробенков Максим Викторович*, ТГУ, ул. Ленина, д. 36, Томск, Россия, 634050, тел: 73822529845, факс: 73822529829, Email: kozulyn@ftf.tsu.ru
89. *Коровина Нелли Александровна*, ИЭВБ РАН, ул. Комзина, 10, Тольятти, Россия, 445003, тел: 8(8482)489174, факс: 8(8482)489174, Email nellitlt@mail.ru
90. *Корчагин Олег Вячеславович*, ИФХЭ РАН, Ленинский просп., д. 31, корп. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 89260822591, Email: oleg-kor83@mail.ru
91. *Костенко Светлана Сергеевна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8(49652)21382, Email kostsv@icp.ac.ru
92. *Кравченко Игорь Витальевич*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8 926 341 11 53, Email krav@icp.ac.ru
93. *Кранина Наталья Александровна*, ВГУ, ул. Университетская пл., д. 1, Воронеж, Россия, 394006, тел: 89204338410, Email: NatalyaKranina@gmail.com
94. *Кувардина Евгения Вячеславовна*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 8-926-160-06-35, Email: janekuardina@yandex.ru
95. *Кудакина Вера Андреевна*, МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, Москва, Россия, 119992, тел: 89162934516, Email: vera257@list.ru
96. *Кудряшова Юлиана Радиковна*, ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, ул. Академика Арбузова, д. 8, Казань, Россия, 420088, тел: (843) 273-22-93, факс: (843) 273-22-53, Email: ablakova\_yuliana@iorc.ru
97. *Кузнецов Михаил Андреевич*, ИФХЭ РАН, Ленинский просп., д. 31, корп. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 89653089795, Email: mikhael.kuznetsov@gmail.com
98. *Кулагина Галина Серафимовна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: (496)5221916, Email gskulagina@rambler.ru

99. *Куница Александр Александрович*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8(49652)21763, Email akunitsa@icp.ac.ru
100. *Курочкин Сергей Александрович*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: (49652)27773, Email oligo@icp.ac.ru
101. *Лазбная Мария Алексеевна*, БелГУ, ул. Победы, д. 85, Белгород, Россия, 308015, тел: (4722)58-54-08, Email lazebnaya@bsu.edu.ru
102. *Ларюшкин Андрей Сергеевич*, ИФХЭ РАН, Ленинский просп., д. 31, корп. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 8-906-785-52-80, Email: larushkin@mail.ru
103. *Лазно Елена Игоревна*, ИВТЭ УрО РАН, ул. С. Ковалевской, д. 22, Екатеринбург, Россия, 620219, тел: 83433623537, Email: volegove-ihte@mail.ru
104. *Лещинская Кира Владимировна*, ИМЕТ РАН, Ленинский просп., д. 49, Москва, Россия, 119991, тел: 499-1359418, Email: kirochka87@list.ru
105. *Лобанов Антон Валерьевич*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 8 (495) 939 7945, Email: avlobanov@mail.ru
106. *Луканина Юлия Константиновна*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: (495)9397348, Email: julialkn@gmail.com
107. *Луценко Николай Анатольевич*, ИАПУ ДВО РАН, ул. Радио, 5, Владивосток, Россия, 690105, тел: (4232)554413, факс: (4232)310452, Email NickL@inbox.ru
108. *Лыго Ольга Николаевна*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: (495)9397336, Email lygo@sky.chph.ras.ru
109. *Ляпкосова Ольга Сергеевна*, ВолГУ, просп. Университетский, д. 100, Волгоград, Россия, 400062, тел: (8442)460812, Email: lyapkosovaolga@mail.ru
110. *Магомедов Рустам Нухкадиевич*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 89263724234, Email: tetrationat@rambler.ru

111. *Майоров Алексей Владимирович*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: +79104558931,  
Email hruc@list.ru
112. *Макеев Мстислав Олегович*, МГТУ им. Н.Э. Баумана, ул. 2-я Бауманская, д. 5, Москва, Россия, 105005, тел: 89263603775,  
Email: mc.stiv@gmail.com
113. *Малков Георгий Васильевич*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семёнова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 84965225118,  
Email gmalkov@icp.ac.ru
114. *Мамин Эльдар Алиевич*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: 89150180571, факс: 84986850236,  
Email Yeldar443@mail.ru
115. *Мамыкин Дмитрий Александрович*, ИОХ УНЦ РАН, проспект Октября, 71, Уфа, РФ, 450054, тел: 8(347)356111,  
Email inbox46@rambler.ru
116. *Манжос Роман Алексеевич*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семёнова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: (496)522-14-04,  
Email rmanzhos@icp.ac.ru
117. *Маракулина Ксения Михайловна*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: 8(495)9397186,  
Email maksmy@mail.ru
118. *Маркевич Александр Васильевич*, УГХТУ, пр. Гагарина, 8, Днепрпетровск, Украина, 4900, тел: +(038) 056 46 07 74,  
Email shembel@onil.dp.ua
119. *Мелкозерова Марина Александровна*, ИХТТ УрО РАН, ул. Первомайская, д. 91, Екатеринбург, Россия, 620041, тел: 8(343)362-35-64,  
Email melkozerova@yandex.ru
120. *Меляева Александра Андреевна*, ИВТЭ УрО РАН, ул. С. Ковалевской, д. 22, Екатеринбург, Россия, 620219, тел: (343)3623540,  
Email a.melyaeva@ihte.uran.ru
121. *Метелица Сергей Игоревич*, ГУ НИИЦ «Кристалл», пр. Свободный, 79, Красноярск, Россия, 660041, тел: +7-(391)-244-53-51, факс: +7-(391)-244-53-51,  
Email metelitsa\_sl@mail.ru

122. *Мироненко Александр Юрьевич*, ИХ ДВО РАН, пр. 100-летия Владивостока, 159, Владивосток, Россия, 690022, тел: 89046276060, Email almironenko@gmail.com
123. *Михайлов Руслан Вячеславович*, СПбГУ, Университетская набережная, д. 79, Санкт-Петербург, Россия, 199034, тел: (812)4284308, Email ruslan1978@mail.ru
124. *Михайлова Зоя Александровна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 89160699910, Email zoya-mikhailova@mail.ru
125. *Мищенко Денис Валерьевич*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8(496)5227089, Email mdv@icr.ac.ru
126. *Моденов Дмитрий Владимирович*, ИВТЭ УрО РАН, ул. С. Ковалевской, д. 22, Екатеринбург, Россия, 620219, тел: (343) 362-32-58, факс: (343) 374-59-92, Email Modenov@ihte.uran.ru
127. *Моцарь Андрей Станиславович*, СГТУ, ул. Политехническая, 77, Саратов, Россия, 410054, тел: 89085522212, Email motsaras@yandex.ru
128. *Мухамадиева Светлана Рифхатовна*, ИОХ УНЦ РАН, проспект Октября, 71, Уфа, РФ, 450054, тел: 8(347)2356111, Email muhamadieva.sveta@yandex.ru
129. *Мясниченко Владимир Сергеевич*, АлтГТУ, пр. Ленина, 46, Барнаул, Российская Федерация, 656038, тел: +7(923)650-89-02, Email viplabs@yandex.ru
130. *Назарова Светлана Валерьевна*, ИОХ УНЦ РАН, проспект Октября, 71, Уфа, Россия, 450054, тел: 8-917-453-60-58, 8-(347)235-55-60, Email rmislamova@mail.ru
131. *Назирова Оксана Дамировна*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 9397373, Email oks.nazirova@yandex.ru
132. *Насонов Павел Анатольевич*, ФГУП РФЯЦ ВНИИТФ, ул. Васильева, 13, а. я. 245., Снежинск, Россия, 456770, тел: 83514654572, факс: (351-46) 54572, Email nasonovpoul@list.ru

133. *Невидимов Александр Владимирович*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: +7 (49652) 22471,  
Email nevidimovsasha@yandex.ru
134. *Ней Вин Тун*, РХТУ им. Д.И. Менделеева, Миусская пл., д. 9, Москва, Россия, 125047, тел: 89154847146 +79162597643,  
Email shcharin@yandex.ru nau.win2011@yandex.ru
135. *Некрасова Яна Андреевна*, СПбГУ ИТМО, пр. Кронверкский, д.49, Санкт-Петербург, Россия, 197101, тел: 8(911)9849207,  
Email Nekrasova@oi.ifmo.ru
136. *Нечаев Григорий Викторович*, ИВТЭ УрО РАН, ул. С. Ковалевской, д. 22, Екатеринбург, Россия, 620219, тел: (343) 362-35-37,  
Email N\_gegory@mail.ru
137. *Низовцев Антон Сергеевич*, ИХКГ СО РАН, ул. Институтская, д. 3, Новосибирск, Россия, 630090, тел: 89138933865,  
Email nizovtsev@kinetics.nsc.ru
138. *Никитин Андрей Павлович*, КемГУ, ул. Красная, д. 6, Кемерово, Россия, 650043, тел: (3842)580591,  
Email nikitin\_an\_pal@yandex.ru
139. *Никифоров Александр Сергеевич*, ЦФ РАН, ул. Новаторов, д. 7а, корп.1, Москва, Россия, 119421, тел: (495) 936-38-50,  
Email 2post@inbox.ru
140. *Новожилев Евгений Павлович*, СГТУ, ул. Политехническая, 77, Саратов, Россия, 410054, тел: 8 (452) 99-86-27, факс: -,  
Email nowogilower2008@rambler.ru
141. *Нуртдинова Карина Фаритовна*, РХТУ им. Д.И. Менделеева, Миусская пл., д. 9, Москва, Россия, 125047, тел: 89037914321,  
Email karish@list.ru
142. *Оводок Евгений Андреевич*, БГУ, ул. Ленинградская, 14, Минск, Беларусь, 220030, тел: 80172008106,  
Email ovodokea@gmail.com
143. *Овчинников Василий Андреевич*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: 8(926)834-28-98,  
Email fizhim@rambler.ru



144. *Пак Анастасия Валерьевна*, ВолГУ, просп. Университетский, д. 100, Волгоград, Россия, 400062, тел: +79275163584,  
Email pak.anastasia@gmail.com
145. *Палладичева Анна Вячеславовна*, РХТУ им. Д.И. Менделеева, Миусская пл., д. 9, Москва, Россия, 125047, тел: (499) 978-49-97, факс: (495) 609-29-64,  
Email pallada-dancer@mail.ru, galina@muctr.ru
146. *Панкратьев Евгений Юрьевич*, ИОХ УНЦ РАН, проспект Октября, 71, Уфа, Россия, 450054, тел: +7-927-3451789,  
Email evgeniy@pankratjev.com
147. *Паширова Татьяна Никандровна*, ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, ул. Академика Арбузова, д. 8, Казань, Россия, 420088, тел: 843 273 2293, факс: 843 273 2253,  
Email pashirova@iopc.ru
148. *Петрова Татьяна Андреевна*, МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, Москва, Россия, 119992, тел: 8(495)9394958,  
Email tatyana.a.petrova@gmail.com
149. *Писарева Анна Владимировна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: (49652)25602,  
Email anuyuta@icp.ac.ru
150. *Пискарев Михаил Сергеевич*, ИСПМ РАН, ул. Профсоюзная, 70, Москва, Россия, 117393, тел: (495) 332-5865, факс: (495) 718-3404,  
Email plasma@ispm.ru
151. *Поздняков Иван Павлович*, ИХКГ СО РАН, ул. Институтская, д. 3, Новосибирск, Россия, 630090, тел: 3833332385, факс: 3833307350,  
Email pozdnyak@kinetics.nsc.ru
152. *Полетаева Дарья Александровна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: +7(496) 52-2-17-15,  
Email daryazhokhova@gmail.com
153. *Польщикова Сергей Владимирович*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 8(964)707-26-92,  
Email sid\_06@bk.ru
154. *Пономарёва Мария Юрьевна*, ГОУ ВПО НИ ТПУ, Томский политехнический университет, ТПУ, проспект Ленина, дом 30, Томск, Россия, 634050, тел: 89138044537,  
Email ponomarewamy@mail.ru

155. *Попов Александр Сергеевич*, ВолГУ, просп. Университетский, д. 100, Волгоград, Россия, 400062, тел: +79173317409,  
Email A.Popov.VolSU@gmail.com
156. *Попова Екатерина Юрьевна*, ОИВТ РАН, 125412, г.Москва, ул.Ижорская, д.13, стр.2, г.Москва, РФ, 125412, тел: (495)484-19-66,  
Email popova.ek.yu@gmail.com
157. *Потапова Татьяна Сергеевна*, МИТХТ им. М.В. Ломоносова, просп. Вернадского, д. 86, Москва, Россия, 119571, тел: 8929-6339053,  
Email alien-jul@rambler.ru
158. *Приемченко Константин Юрьевич*, ОИВТ РАН, 125412, г.Москва, ул.Ижорская, д.13, стр.2, г.Москва, РФ, 125412, тел: (905)703-7280,  
Email priemchenko@gmail.com
159. *Проматов Владимир Васильевич*, ИФПМ СО РАН, пр. Академический 2/4, Томск, Россия, 634021, тел: 8-962-787-21-28, факс: (3822) 49-25-76,  
Email vvpromakhov@mail.ru
160. *Пронкин Павел Геннадьевич*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: 8-926-581-77-40,  
Email pronkinp@gmail.com
161. *Прошина Анастасия Юрьевна*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 8-926-704-44-47,  
Email dmitrieva11@ya.ru
162. *Птицына Анна Александровна*, ИОХ РАН, Ленинский просп., д. 47, Москва, Россия, 119991, тел: 89174444707,  
Email Ptitcina2@yandex.ru
163. *Разметов Аян Нурумович*, МИТХТ им. М.В. Ломоносова, просп. Вернадского, д. 86, Москва, Россия, 119571, тел: +79265635667,  
Email ayan.rakhmetov@gmail.com
164. *Рогозина Марина Викторовна*, ВолГУ, просп. Университетский, д. 100, Волгоград, Россия, 400062, тел: 8(8442)788207,  
Email marinkarogozina@yandex.ru
165. *Рыбкин Александр Юрьевич*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семёнова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 2-17-15,  
Email pbib@mail.ru

166. *Рыжкова Оксана Владимировна*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: 8-926-583-59-98,  
Email [dioxan@yandex.ru](mailto:dioxan@yandex.ru)
167. *Савин Иван Владимирович*, МФТИ, Институтский переулок, 9, Долгопрудный, Россия, 141700, тел: 89057636401,  
Email [ivan.savin@phystech.edu](mailto:ivan.savin@phystech.edu)
168. *Салганский Евгений Александрович*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8-49652-21042,  
Email [sea@icp.ac.ru](mailto:sea@icp.ac.ru)
169. *Сафаров Фарит Эрикович*, ИОХ УНЦ РАН, проспект Октября, 71, Уфа, РФ, 450054, тел: (347)2356111,  
Email [farit\\_safarov@mail.ru](mailto:farit_safarov@mail.ru)
170. *Сафонова Татьяна Васильевна*, НИУ ГОУ ВПО ЮУрГУ, проспект им. В. И. Ленина, 76, Челябинск, Россия, 454080, тел: +79080459604, факс: +7(351)2679917,  
Email [sova87.87@mail.ru](mailto:sova87.87@mail.ru)
171. *Сафронов Николай Евгеньевич*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: (495)9397252, факс: (495)6512191,  
Email [niksafronov@yandex.ru](mailto:niksafronov@yandex.ru)
172. *Свидченко Евгения Александровна*, ИСПМ РАН, ул. Профсоюзная, 70, Москва, Россия, 117393, тел: (495) 332-58-39,  
Email [evgensv@yandex.ru](mailto:evgensv@yandex.ru)
173. *Седов Игорь Владимирович*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: (496) 522-12-49,  
Email [isedov@icp.ac.ru](mailto:isedov@icp.ac.ru)
174. *Семенова Ольга Александровна*, ИГХТУ, просп. Ф. Энгельса, д. 7, Иваново, Россия, 153000, тел: 8-920-370-38-78,  
Email [oa-semenova@mail.ru](mailto:oa-semenova@mail.ru)
175. *Сергеев Михаил Олегович*, РХТУ им. Д.И. Менделеева, Миусская пл., д. 9, Москва, Россия, 125047, тел: 89099592436,  
Email [Mihail-ol-sergeev@yandex.ru](mailto:Mihail-ol-sergeev@yandex.ru)
176. *Силантьев Михаил Александрович*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 84965225454,  
Email [silantiev@mihail@mail.ru](mailto:silantiev@mihail@mail.ru)

177. *Силкин Сергей Владимирович*, ИХР РАН, ул. Академическая, д. 1, Иваново, Россия, 153045, тел: 89050588157,  
Email SSV-bunker@rambler.ru
178. *Симонов Сергей Владимирович*, ИФТТ РАН, Институтская ул., д. 2, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 4965225326,  
Email simonovsv@rambler.ru
179. *Скрипняк Наталья Владимировна*, ТГУ, ул. Ленина, д. 36, Томск, Россия, 634050, тел: 83822 420680, факс: 83822529829,  
Email skrp@ftf.tsu.ru
180. *Скрипняк Владимир Владимирович*, ТГУ, ул. Ленина, д. 36, Томск, Россия, 634050, тел: 83822420680, факс: 83822529829,  
Email skrp2006@yandex.ru
181. *Смолина Анастасия Васильевна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 21715,  
Email ansmolina@gmail.com
182. *Соколова Екатерина Михайловна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 2-15-57,  
Email Ekaterina\_Sokolova89@mail.ru
183. *Сорокина Ольга Николаевна*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: (495)9397366, факс: (499)1374101,  
Email alsiona@gmail.com
184. *Спесивцева Ирина Владимировна*, УрГУ, пр. Ленина, 51, Екатеринбург, Россия, 620000, тел: 8-904-544-21-67,  
Email ispesivtseva\_usu@e1.ru
185. *Старчак Елена Евгеньевна*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 89152488035,939-73-73,  
Email star2004i341@rambler.ru
186. *Студеникин Иван Александрович*, ИСМАН, ул. Институтская, д. 8, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 89055784506,  
Email stivan@bk.ru
187. *Судоргин Сергей Александрович*, ВолГУ, просп. Университетский, д. 100, Волгоград, Россия, 400062, тел: 89177252733,  
Email sergsud@mail.ru
188. *Султанбаев Михаил Валерьевич*, ИОХ УНЦ РАН, проспект Октября, 71, Уфа, Россия, 450054, тел: 8 (347) 2356111,  
Email chemlum@anrb.ru

189. *Сухина Надежда Сергеевна*, ИФТТ РАН, Институтская ул., д. 2, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8-49652-22403,  
Email suhinina@issp.ac.ru
190. *Таланцев Артем Дмитриевич*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8(49652)25134,  
Email artgtx32@mail.ru
191. *Тарасевич Дарья Васильевна*, НИИ физики ОНУ им. И. И. Мечникова, ул. Пастера 27, Одесса, Украина, 65082, тел: 0487026051,  
Email dasha\_tar@ukr.net
192. *Тарасов Александр Евгеньевич*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 2-55-82,  
Email atarasov@icp.ac.ru
193. *Тарасова Наталья Александровна*, УрГУ, пр. Ленина, 51, Екатеринбург, Россия, 620000, тел: 89049892652,  
Email tarasova-nataliya@yandex.ru
194. *Темнова Мария Львовна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8-(496)-522-18-94,  
Email temnovam@gmail.com
195. *Тимонина Анна Владимировна*, ИФТТ РАН, Институтская ул., д. 2, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8-49652-2-27-90,  
Email avtim@issp.ac.ru
196. *Титов Виктор Владимирович*, СПбГУ, Университетская набережная, д. 79, Санкт-Петербург, Россия, 199034, тел: (812)4284308,  
Email rvm78@list.ru
197. *Трипачев Олег Васильевич*, ИФХЭ РАН, Ленинский просп., д. 31, корп. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 8-917-581-89-12,  
Email tochem@gambler.ru
198. *Тронь Артур Валерьевич*, НИЛХИТ, пр. Гагарина 8, г. Днепропетровск, Украина, 49005, тел: +38 93 145 20 68, факс: +38 93 145 20 68,  
Email Cobalt\_2008@mail.ru
199. *Тулибаева Галия Зайнетдиновна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8-916-592-59-39,  
Email tulibaeva@gmail.com

200. *Уваров Михаил Николаевич*, ИХКГ СО РАН, ул. Институтская, д. 3, Новосибирск, Россия, 630090, тел: +7-(383)-333-22-97, факс: +7-(383)-330-73-50,  
Email [uvarov@kinetics.nsc.ru](mailto:uvarov@kinetics.nsc.ru)
201. *Ушеренко Юлия Сергеевна*, ОАО, ул.Корженевского, 12, к. 313, Минск, Республика Беларусь, 220108, тел: +375298702749,  
Email [usherenko@gmail.com](mailto:usherenko@gmail.com)
202. *Файнгольд Евгений Ефимович*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: +7(49652)21346,  
Email [fevgeny@mail.ru](mailto:fevgeny@mail.ru)
203. *Файнгольд Ирина Игоревна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: +7(94652)2-17-15,  
Email [ifaingold@mail.ru](mailto:ifaingold@mail.ru)
204. *Фенин Анатолий Александрович*, РХТУ им. Д.И. Менделеева, Миусская пл., д. 9, Москва, Россия, 125047, тел: (495)9485464,  
Email [fmkfenin@rctu.ru](mailto:fmkfenin@rctu.ru)
205. *Филлипова Кристина Николаевна*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: 8-916-289-90-89,  
Email [filippova.kristin@yandex.ru](mailto:filippova.kristin@yandex.ru)
206. *Филлипович Елена Антоновна*, БГУ, ул. Ленинградская, 14, Минск, Беларусь, 220030, тел: +375 17 2008106,  
Email [elenafilepovich@yahoo.com](mailto:elenafilepovich@yahoo.com)
207. *Фокин Илья Геннадьевич*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: (49652) 215 30,  
Email [ilia@icrp.ac.ru](mailto:ilia@icrp.ac.ru)
208. *Хатмуллина Кюнсылу Гумеровна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 2-56-25,  
Email [khatmullina\\_k@mail.ru](mailto:khatmullina_k@mail.ru)
209. *Хватов Анатолий Владимирович*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: (495)9397149,  
Email [hvatovanatoliy@gmail.com](mailto:hvatovanatoliy@gmail.com)
210. *Хорев Михаил Сергеевич*, ИХР РАН, ул. Академическая, д. 1, Иваново, Россия, 153045, тел: +7 902 746 23 86,  
Email [khorev\\_mikhail@mail.ru](mailto:khorev_mikhail@mail.ru)

211. *Цветкова Дарья Сергеевна*, МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, Москва, Россия, 119992, тел: +7 (495) 939 3218, +7 (925) 050 1930,  
Email d.s.tsvetkova@hotmail.com
212. *Цымбаренко Дмитрий Михайлович*, МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, Москва, Россия, 119992, тел: +7 495 9390029, факс: +7 495 9391492,  
Email tsymbarenko@inorg.chem.msu.ru
213. *Часовская Татьяна Евгеньевна*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: +7 905 518 6329,  
Email t.chasovskaya@yandex.ru
214. *Черненко Алина Сергеевна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8(49652)25134,  
Email Mrs.Chernenkaya@yandex.ru
215. *Шамина Елена Николаевна*, ВолГУ, просп. Университетский, д. 100, Волгоград, Россия, 400062, тел: 89033275463,  
Email shamina.alena@gmail.com
216. *Шаповалова Оксана Вячеславовна*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 89266619176,  
Email oksik87@front.ru
217. *Шевченко Наталья Николаевна*, ИВС РАН, В.О., Большой просп., д. 31, Санкт-Петербург, Россия, 199004, тел: 8(812)3235025, факс: 8(812)3286869,  
Email nata\_non@hq.mascg.ru
218. *Шеринёв Виталий Александрович*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 89268931147,  
Email femtos@mail.ru
219. *Шпачев Александр Николаевич*, ТГУ, ул. Ленина, д. 36, Томск, Россия, 634050, тел: 89234042709,  
Email alex18023@mail.ru
220. *Шлотгауэр Анна Артуровна*, ИХКГ СО РАН, ул. Институтская, д. 3, Новосибирск, Россия, 630090, тел: 8-923-241-31-48,  
Email schlotgauer\_a@mail.ru
221. *Шматко Наталья Юрьевна*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: 8-(496)-522-18-94,  
Email timur@cat.icp.ac.ru

222. *Шмельков Юрий Борисович*, ЭНИН, Волгоградский проспект, д. 152, корп. 2, кв. 47, Москва, Россия, 109439, тел: 8-917-5479062, Email YurezSml@mail.ru
223. *Шупик Мария Александровна*, ИБХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119334, тел: 8-910-426-18-95, Email mariashupik@gmail.com
224. *Юданов Владислав Васильевич*, ВолГУ, просп. Университетский, д. 100, Волгоград, Россия, 400062, тел: (8442) 46-08-12, Email yudanov-volsu@yandex.ru
225. *Юдина Алёна Владимировна*, ИГХТУ, просп. Ф. Энгельса, д. 7, Иваново, Россия, 153000, тел: 89206705286, Email gvinok@yandex.ru
226. *Юркова Мария Павловна*, ИХКГ СО РАН, ул. Институтская, д. 3, Новосибирск, Россия, 630090, тел: (383)3332385, факс: (383)3307350, Email yurkova@kinetics.nsc.ru
227. *Юхаева Гузель Равиловна*, ИХФ РАН, ул. Косыгина, д. 4, Москва, Россия, 119991, тел: 89151735777, Email guzel327@gmail.com
228. *Якушев Владислав Владиславович*, ИПХФ РАН, про-кт Ак. Н.Н. Семенова д.1, Черноголовка, Россия, 142432, тел: (49652)24125, Email yakushev@ficr.ac.ru
229. *Яцкевич Екатерина Игоревна*, ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, ул. Академика Арбузова, д. 8, Казань, Россия, 420088, тел: +7 (843) 2732293, Email katerina.yatzkevitch@yandex.ru
230. *Яшин Алексей Геннадьевич*, СГТУ, ул. Политехническая, 77, Саратов, Россия, 410054, тел: 89270593968, Email yashinag@mail.ru