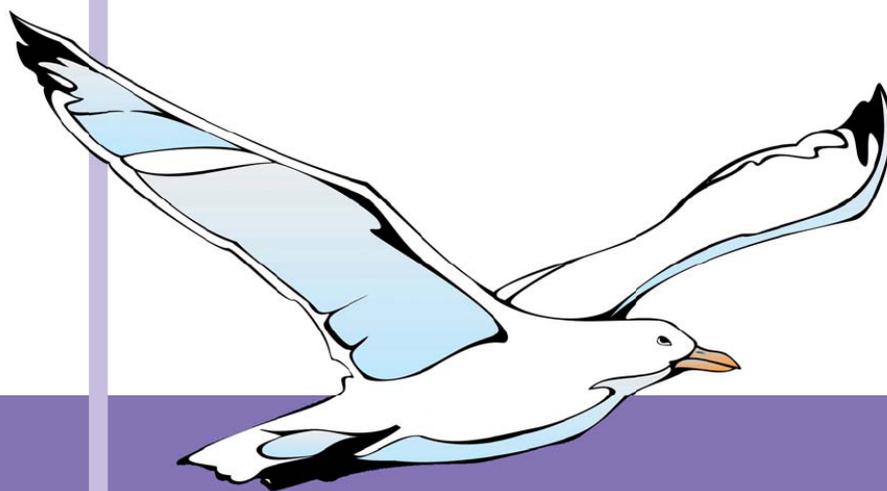


ТУАПСЕ 2018

Современная химическая физика

XXX Симпозиум



сборник
аннотаций

16 - 27 сентября 2018 года
Пансионат «Маяк», г. Туапсе

ISBN 978-5-85493-204-2

Современная химическая физика
XXX Симпозиум

Сборник аннотаций

ISBN 978-5-85493-204-2

УВАЖАЕМЫЕ УЧАСТНИКИ XXX СИМПОЗИУМА «СОВРЕМЕННАЯ ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»!

Вот уже в тридцатый раз мы собираемся на Симпозиуме для того, чтобы обменяться научными новостями и узнать о новых достижениях коллег. Как и в предыдущем году, сборнику трудов Симпозиума присвоен номер международной стандартной нумерации ISBN, что позволит всем желающим найти тезисы в библиотеках страны.

Под эгидой Симпозиума из года в год мы стремимся объединить как можно больше специалистов по нанотехнологиям и профессионалов из смежных областей. Отрадно, что на научных мероприятиях становится все больше молодежи. Студенты, аспиранты и молодые ученые из разных городов России и ближнего зарубежья приезжают на Симпозиум с устными и стендовыми докладами. Приятно осознавать, что у Симпозиума есть и постоянные участники, без которых не обходится ни одно мероприятие. Они вносят большой вклад в развитие научных дискуссий, и, мы надеемся, продолжат эту добрую традицию и в будущем.

Спасибо всем, кто принял участие в XXX Симпозиуме «Современная химическая физика»!

Желаем вам творческих и профессиональных успехов в следующем году!

Оргкомитет

ОРГАНИЗАТОРЫ:

Президиум Российской академии наук

Отделение химии и наук о материалах РАН

Российский фонд фундаментальных исследований

Федеральное агентство научных организаций

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

*Институт химической физики им. Н.Н.Семенова Российской
академии наук*

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

*Институт проблем химической физики Российской академии
наук*

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С.
Ениколопова Российской академии наук*

Московский государственный университет имени

М.В.Ломоносова

НП «Центр диагностики наноструктур и наноматериалов»

Мероприятие проводится при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 18-03-20055

ОРГКОМИТЕТ

Председатель, Директор

проф. Шуб Б.Р.

Председатель программного комитета

акад. Бучаченко А.Л.

Члены организационного и программного комитетов

акад. Алдошин С.М.
акад. Алфимов М.В.
чл.-корр. Анаников В.П.
акад. Берлин А.А.
акад. Бухтияров В.И.
чл.-корр. Гехман А.Е.
проф. Гордон Е.Б.
проф. Корчак В.Н.
д.ф.-м.н. Медведев С.П.
проф. Мельников М.Я.
акад. Музафаров А.М.
проф. Немухин А.В.
чл.-корр. Озерин А.Н.
акад. Пармон В.Н.
проф. Плахутин Б.Н.
проф. Товбин Ю.К.
проф. Трахтенберг Л.И.
проф. Флид В.Р.
акад. Цветков Ю.Д.
проф. Цодиков М.В.
проф. Шушин А.И.

Рабочая группа

Гатин А.К. (ученый секретарь)
Сарвадий С.Ю.
Шарова М.В.

Конкурсная комиссия

акад. Бучаченко А.Л.
проф. Корчак В.Н.
проф. Трахтенберг Л.И.
проф. Товбин Ю.К.
проф. Цодиков М.В.
проф. Шуб Б.Р.

ПРОГРАММА СИМПОЗИУМА

16 СЕНТЯБРЯ, ВОСКРЕСЕНЬЕ

Заезд участников. Регистрация.

17 СЕНТЯБРЯ, ПОНЕДЕЛЬНИК

Утренняя сессия

Ведущий: проф. Шуб Б.Р.

10.00 Открытие Симпозиума

10.30 **Трахтенберг Леонид Израйлевич** "Моделирование сенсорных свойств и поглощения ультракоротких лазерных импульсов металлоксидными пленками"

11.10 **Бучаченко Анатолий Леонидович** "Ядерно-магнитный контроль раковых клеток"

Вечерняя сессия

Биохимическая физика

Ведущий: академик Бучаченко А.Л.

15.00 **Немухин Александр Владимирович** "Молекулярное моделирование механизмов регуляции активности ферментов"

15.40 **Бердинский Виталий Львович** "Спинзависимые механизмы биологической ферментативной магниточувствительности"

15.55 **Хренова Мария Григорьевна** "Молекулярное моделирование флуоресцентных белков на основе флавина и его производных"

16.10 **Белашов Андрей Владимирович** "Неинвазивное исследование процессов фотоиндуцированной клеточной смерти с помощью голографической микроскопии"

16.25 **Жихорева Анна Александровна** "Анализ гибели клеток рака яичников у крыс линии Wistar после химиотерапии методами цифровой голографической микроскопии"

18 СЕНТЯБРЯ, ВТОРНИК

Утренняя сессия

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии, химическая физика поверхности

Ведущий: проф. Кожушнер М.А.

9.00 **Чумакова Наталья Анатольевна** "Свойства оксида графита и мембран на его основе по данным спектроскопии ЭПР"

9.30 **Маковийчук Мирослав Иванович** "Практическая реализация дефектно-примесной инженерии в микро- и нанотехнологии"

9.45 **Лебедев Николай Геннадьевич** "Квантовая модель магнитомягкого деформированного ферромагнетика"

10.00 **Лебедева Ольга Сергеевна** "Эластопроводимость примесных графеновых нанолент"

10.15 Перерыв

10.25 **Стецюра Светлана Викторовна** "Фотоэлектронные процессы на границах раздела α -Si / Si и полиэлектролит/ α -Si, определяющие эффективность адсорбции полиэлектролита"

10.40 **Рахимов Тохир Хакимович** "Смещение граничных размеров активности наночастиц"

10.55 **Трубина Светлана Владимировна** "Влияние цинка на структуру и свойства катализаторов Pt/Mg(Zn)AlO_x, полученных на основе слоистых двойных гидроксидов"

Вечерняя сессия

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии

Ведущий: к.ф.-м.н. Кожевин В.М.

16.00 **Чернозатонский Леонид Александрович** "Гетероструктуры на основе графена: реальность и перспективы"

16.30 **Чернавский Петр Александрович** "Особенности топохимических реакций в наночастицах"

17.00 **Бричкин Сергей Борисович** "Квантовые точки перовскитов - будущее фотовольтаики"

17.20 **Будыка Михаил Федорович** "Молекулярные модели графеновых квантовых точек"

17.40 Перерыв

17.45 **Эренбург Симон Борисович** "Исследование особенностей микроструктуры и электронного строения многослойных гетеросистем с квантовыми точками Ge/Si, легированными Mn"

18.00 **Невидимов Александр Владимирович** "Математическое моделирование безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения в нанокластерах коллоидных квантовых точек"

18.15 **Гатин Андрей Константинович** "Адсорбция и взаимодействие водорода и кислорода на поверхности нанесенных наночастиц золота"

18.30 **Кочетков Роман Александрович** "Влияние условий синтеза на пирофорность и удельную поверхность наночастиц Ni"

19 СЕНТЯБРЯ, СРЕДА

Утренняя сессия

10.00 Стендовая сессия № 1 (нанохимия, нанофизика и нанотехнологии, химическая физика поверхности)

1. **Акбаров Хамдам Икрамович** "Термодинамические свойства водорастворимых ацетатов целлюлозы и их композиций"

2. **Берестнева Юлия Васильевна** "Соединения соинтеркалирования нитрата графита - перспективные предшественники углеродных наночастиц"

3. **Волков Владимир Тимофеевич** "Температурная зависимость магнитосопротивления в модифицированном графене "

4. **Гак Владимир Юрьевич** "Влияние 1,6-гександитиола как стабилизирующего лиганда на мерцание флюоресценции коллоидных квантовых точек InP@ZnS"

5. **Гребенщиков Юрий Борисович** "Динамика аморфных ферромагнитных микропроводов на основе Co в слабых магнитных полях"

6. **Гришин Максим Вячеславович** "Адсорбционные свойства наноструктурированной золото-медной пленки на графите"

7. **Гришин Максим Вячеславович** "Морфология и электронное строение покрытия, образованного наночастицами золота и меди, на графите"

8. **Гришин Максим Вячеславович** "Физико-химические свойства покрытия на основе Ni и Pd наночастиц"

9. **Гришин Максим Вячеславович** "Морфология золотых и никелевых наноструктурированных покрытий, созданных различными методами на поверхности графита"

10. **Жиляева Елена Ивановна** "Молекулярные проводники BEDT-TTF с анионами на основе галогенидов висмута"

11. **Жиляева Елена Ивановна** "Иодокадмиаты бис(этилендитио)тетрааифульвалена"

12. **Завьялов Сергей Алексеевич** "Влияние концентрации наполнителя на ИК-спектры и топографию поверхности пленок ППК-PbS"

13. **Завьялов Сергей Алексеевич** "ИК-спектры тонких пленок полимерных наноконкомпозитов на основе ППК и сульфидов, полученных методом VDP"
14. **Загайнов Игорь Валерьевич** "Мезопористые наноматериалы на основе твердых растворов диоксида церия: получение и свойства"
15. **Зайцева Елена Сергеевна** "Влияние колебаний, шероховатости и деформированности поверхности на ее поверхностную энергию при адсорбции"
16. **Гаврилова Елена Леонидовна** "Супрамолекулярные системы на основе ПАВ и макроциклов для повышения растворимости и биодоступности гидрофобных лекарственных веществ"
17. **Зубкова Екатерина Игоревна** "СТМ-исследование наночастиц меди на графите"
18. **Ивичева Светлана Николаевна** "Особенности синтеза сиалона с использованием золь-гель метода"
19. **Ивичева Светлана Николаевна** "Получение трехмерных наноконкомпозитов на основе опаловых матриц и аэрогелей при обработке ксерогелей спиртами в сверхкритических условиях"
20. **Кирсанкин Андрей Александрович** "Электронное строение кластеров $Cu_{13}Ni_m$, $m=1-12$ "
21. **Ковальчукова Ольга Владимировна** "Комплексные соединения титана(IV) как прекурсоры для синтеза наноразмерных катализаторов фотодеградации полифенолов"
22. **Костров Андрей Николаевич** "Активация когерентного акустического фона быстрого переносом электрона в реакции редокс-тушения экситона CdSe метилвиологеном"
23. **Леонова Лиана Юрьевна** "Спектральные свойства органических красителей тиазинового ряда"
24. **Мусаев Хусниддин Бахтиёрович** "Структурные закономерности синтеза полимер-темплатированных SiO_2-TiO_2 наноматериалов"
25. **Прокофьев Сергей Ильич** "Зависимость тепловых колебаний нановключения жидкого свинца на дислокации в алюминии от температуры"
26. **Румянцев Борис Михайлович** "Фотоиндуцированные процессы и магнитные спиновые эффекты в полимерных пленках композитов с микрокристаллами рубрена и магнитными наночастицами при лазерном возбуждении"
27. **Румянцев Борис Михайлович** "Влияние электрического и магнитного полей на фотопроцессы с участием ион-радикальных пар в полимерных фотопроводниках"
28. **Сарвадий Сергей Юрьевич** "Локальная характеристика оксидного слоя титанового покрытия на поверхности высокоориентированного пиролитического графита методами АСМ и СТМ/СТС"
29. **Свалова Анна Ивановна** "Моделирование процессов перекоденсации методом Монте-Карло на примере системы из 100 наночастиц Au_{100} "
30. **Фазлетдинов Тимур Равильевич** "Стеклообразование в системе $GeSe_2 - As_2Se_3 - Sb_2Se_3 - Ag_2Se$ "

31. **Флакина Александра Михайловна** "Новые катион-радикальные соли BEDT-TTF с анионами на основе галогенидов сурьмы(III)"
32. **Харитонов Василий Анатольевич** "Физико-химические свойства двухкомпонентных нанокатализаторов на основе борорганических и платиновых наночастиц"
33. **Эренбург Симон Борисович** "XAFS- исследование микроструктуры high-k диэлектрических элементов для мемристорных структур"
34. **Гапанович Михаил Вячеславович** "Влияние условий отжига на электрофизические свойства тонких пленок CZTSe, получаемых методом последовательного электрохимического осаждения"
35. **Гатин Андрей Константинович** "Физико-химические свойства двухкомпонентных покрытий на основе наночастиц металлов"
36. **Звягина Ольга Владимировна** "Топологические и оптические свойства пленок сульфида кадмия, легированного ионами Ag^+ , Cu^{2+} "
37. **Каюмов Руслан Рифатович** "Влияние ДМСО на физико-химические свойства аммонийной формы Нафиона"
38. **Маматкулов Шавкат Исраилович** "Адсорбция ионов на межфазной границе вода-гидрофобная матрица"
39. **Разумцев Александр Алексеевич** "Получение стехиометрической ориентированной пленки Ag_2Se лазерной абляцией"
40. **Ракитин Владимир Валерьевич** "Исследование условий образования кестеритной фазы методом CBD на различных подложках"
41. **Свиридова Лиана Николаевна** "Адсорбционные явления в системе кукурбит[7]урил+ферроцен на межфазной границе электрод/раствор"
42. **Терентьев Алексей Владимирович** "Способы учёта водородной связи в полуэмпирических расчётах термодинамических характеристик при физической адсорбции спиртов и аминов"
43. **Ульянов Алексей Владимирович** "Кинетика разложения фенола на поверхности шунгита"
44. **Ульянов Алексей Владимирович** "Разложение гидразина на поверхности шунгитового материала"

Вечерняя сессия

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии

Ведущий: проф. Трахтенберг Л.И.

16.00 **Товбин Юрий Константинович** "Проблемы расчета поверхностного натяжения в трех-агрегатных системах"

16.40 **Зайцева Елена Сергеевна** "Методика расчетов поверхностного натяжения в системе пар - жидкость"

16.55 **Харитоновна Полина Геннадьевна** "Радиационно-стимулированные процессы в гетерофазной фоточувствительной структуре под действием излучений различной природы"

17.10 Перерыв

17.15 **Фатыхова Гузалия Альбертовна** "Новые амфифильные производные каликс[4]аренов с катионными и анионными головными группами: синтез и изучение агрегационных свойств"

17.30 **Харламов Владимир Федорович** "Электропроводность пленок, состоящих из наночастиц, без омических потерь"

17.45 **Рзаев Юсиф Рза** "Устойчивость нефтей при их смешении по данным динамического рассеяния света"

20 СЕНТЯБРЯ, ЧЕТВЕРГ

Утренняя сессия

Квантовая химия

Ведущий: проф. Немухин А.В.

9.00 **Игнатов Станислав Константинович** "Структура и свойства нейтральных, заряженных и функционализированных кластеров платины и родия"

9.20 **Невидимов Александр Владимирович** "Квантово-химическое моделирование адсорбции различных аминов на поверхности коллоидных квантовых точек CdSe и ZnS"

9.35 **Дохликowa Надежда Владимировна** "DFT-моделирование адсорбции водорода на интерфейсе наночастицы золота и графита"

9.50 **Завелев Денис Ефимович** "Изучение механизмов деоксигенации сложных эфиров на Pt-Sn катализаторах методом функционала плотности"

10.05 **Логина Анастасия Сергеевна** "Моделирование композитных полимеров на основе полититаноксида и наночастиц золота. Квантовохимическое исследование"

10.20 Перерыв

10.25 **Туровцев Владимир Владимирович** "Модель расчета термодинамических свойств веществ в ангармоническом приближении"

10.40 **Орлов Юрий Димитриевич** "Аддитивность свойств соединений: квантовомеханическая интерпретация"

10.55 **Новосадов Борис Константинович** "Свойства стационарного уравнения Дирака в импульсном представлении и решение задачи об электроны в поле ядер молекулы"

11.10 **Скитневская Анна Дмитриевна** "Изучение вибронных взаимодействий в катионах органических молекул с участием нескольких электронных состояний"

11.25 **Наумов Владимир Сергеевич** "Растворение полиаминогликанов в водных средах. Влияние кислотности среды и молекулярной массы полимера на кинетику растворения. Молекулярно-динамическое исследование"

Вечерняя сессия

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии, кинетика и динамика химических реакций

Ведущий: проф. Ростовщикова Т.Н.

16.00 **Гриценко Владимир Алексеевич** "Нанотехнологии и квантово-химическое моделирование в разработке трехмерной 3D флэш памяти нового поколения"

16.30 **Кожевин Владимир Михайлович** "Возбуждение молекул в сильном электрическом поле, генерируемом при влете этих молекул в зазоры между металлическими наночастицам"

16.50 **Шушин Анатолий Иванович** "Кинетика спада быстрой флуоресценции в органических полупроводниках. Эффект миграции T-экситонов"

17.10 **Дьяков Юрий Алексеевич** "Динамика возбужденных состояний циклических гетероатомных молекул"

17.25 Перерыв

17.30 **Козловский Александр Валерьевич** "Влияние электронных и фотохимических процессов на вид вольт-фарадных характеристик структур "электролит-полупроводник", полученных методом фотостимулированной адсорбции"

17.45 **Костюкевич Юрий Иродионович** "Метод ион-молекулярных реакций в современной масс-спектрометрии"

18.00 **Киселёв Владимир Дмитриевич** "Реакции циклоприсоединения при высоком давлении: влияние давления на скорость и равновесие"

18.15 **Капралова Галина Александровна** "Использование численного моделирования для определения констант скорости ряда реакций борорганических соединений"

18.30 **Чайкина Юлия Александровна** "Роль "геометрического фактора" в наблюдении углового распределения интенсивности критической опалесценции CO₂"

21 СЕНТЯБРЯ, ПЯТНИЦА

Утренняя сессия

10.00 Стендовая сессия № 2 (биохимическая физика, нанобиология, биофотоника, высокомолекулярные соединения, квантовая химия)

1. **Бучельников Анатолий Сергеевич** "Исследование самоассоциации антибиотика топотекана в водном растворе методом ЯМР-диффузометрии"
2. **Вассерман Любовь Александровна** "Структурные и термодинамические свойства кукурузного крахмала, подвергнутого ферментативному гидролизу глюкоамилазой"
3. **Корнилова Татьяна Анатольевна** "Резистентность бактерий *Escherichia coli* к ансамицинам в присутствии изотопов магния"
4. **Куртикян Тигран Степанович** "Шести-координационные нитрозильные комплексы Fe(II)-порфиринов с проксимальным диметилсульфоксидным лигандом"
5. **Легута Ульяна Григорьевна** "Влияние магнитных взаимодействий на элементный состав бактериальных клеток"
6. **Легута Сергей Николаевич** "Фотодинамическая инаktivация микроорганизмов экзогенными фотосенсибилизаторами"
7. **Сажина Наталья Николаевна** "Ингибированное окисление липосом фосфатидилхолина в водной среде"
8. **Ткачев Ярослав Владимирович** "Конформационный анализ цитоплазматического домена калнексина для моделирования интерфейса взаимодействия с белком Nef"
9. **Андреев Сергей Михайлович** "Дендримерные поликатионные пептиды - эффективные генные транспортеры "
10. **Веденкин Александр Сергеевич** "Исследование фармакокинетики нового производного тиазолидин-2,4-диона в составе топической лекарственной формы"
11. **Втюрина Дарья Николаевна** "Протективные свойства азотнокислого лантана по отношению к патогенам с различными морфофункциональными свойствами"
12. **Втюрина Дарья Николаевна** "Роль *Entamoeba gingivalis* и *Trichomonas tenax* в микрофлоре ротовой полости человека"
13. **Михалева Мария Геннадьевна** "Получение синтетического природоподобного волокна из целлюлозы методом прямого растворения в ионной жидкости"
14. **Максименко Ольга Олеговна** "О влиянии тонких отличий в свойствах низкомолекулярного полилактида с концевыми карбоксильными группами на свойства наночастиц из него с доксорубицином"
15. **Рогова Дарья Александровна** "Измерение морфологических характеристик клеток HeLa при фотодинамическом воздействии методом голографической томографии"

16. **Спирёва Дарья Вадимовна** "Изучение кальциевой сигнализации в одиночных тромбоцитах"
17. **Зюбин Андрей Юрьевич** "Поверхностно-усиленная спектроскопия комбинационного рассеяния в исследовании сывороточного альбумина человека при сепсисе"
18. **Матвеева Карина Игоревна** "Конфокальная микроскопия высыхающей капли жидкости, допированной наночастицами серебра варьируемого размера"
19. **Шелаев Иван Викторович** "Фемтосекундная динамика переноса электрона в реакционном центре комплексов ядра фотосистемы 2 при низких температурах"
20. **Шелаев Иван Викторович** "Фемтосекундная pump-probe спектроскопия элементарного акта фотохимических превращений в Na⁺ родопсинах"
21. **Штамм Елена Валентиновна** "Химические и биологические методы экспрессной интегральной оценки состояния поверхностных водных объектов суши, подвергающихся многофакторным антропогенным воздействиям"
22. **Барашкова Ирина Ивановна** "Молекулярная динамика полимеров на поверхности шунгита"
23. **Бекчанов Даврон Жумазарович** "Физико-химические характеристики анионита, полученного на основе гранулированного пластикат поливинилхлорида"
24. **Беломоина Наталия Михайловна** "Свойства сополимеров, полученных в сверхкритической среде"
25. **Бессонова Наталья Павловна** "Энергетические эффекты при деформации низко кристаллических полиолефинов"
26. **Бужин Михаил Игоревич** "Синтез растворимого полинафтоиленбензимидазола на основе 1,3-бис(3,4-диаминофеноксид)бензола и диангидрида 1,3-бис-(1,8-дикарбокси-нафтоил-4)бензола"
27. **Булычева Елена Георгиевна** "Иономерные полифенилхиноксалины и их комплексы с поверхностно-активным веществом"
28. **Булычева Елена Георгиевна** "Протонопроводящие мембраны на основе модифицированных сульфированных полифенилхиноксалинов"
29. **Калинина Ирина Георгиевна** "Взаимосвязь электрического сопротивления изоляции из поливинилхлорида и биомассой микроскопического гриба *Aspergillus niger*"
30. **Кечекьян Петр Александрович** "Новые жёсткоэластичные материалы на основе полукристаллических полимеров "
31. **Кечекьян Петр Александрович** "Получение газоразделительных мембран на основе ПЭТФ, деформированного по механизму крейзинга"
32. **Ковалев Алексей Иванович** "Микропористые полифенилены"
33. **Кочервинский Валентин Валентинович** "Особенности электрофизических характеристик сегнетоэлектрических сополимеров винилиденфторида, допированных молекулами Родамин 6Ж"
34. **Кузнецов Никита Михайлович** "Исследование структуры электрореологических жидкостей, наполненных слоистыми алюмосиликатами"

35. **Макарян Ирэн Арменовна** "Сверхкритические флюиды для получения полимерных частиц и покрытий"
36. **Маклакова Ирина Александровна** "Свойства композиционных материалов на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена и бора, полученных полимеризацией *in situ*"
37. **Митряева Наталья Сергеевна** "Динамические свойства эластомерных композитов, наполненных многостенными углеродными нанотрубками"
38. **Мухамедиев Мухтаржан Ганиевич** "Структурные и сорбционные характеристики ионитов на основе поливинилхлорида"
39. **Родин Виктор Михайлович** "Низкомолекулярные сополимеры этилена со фтормономерами"
40. **Роечко Алексей Валерьевич** "Синтез мультиблок-сополимеров норборнена и циклооктенов с кислородсодержащими заместителями реакцией полимерного кросс-метатезиса"
41. **Сидоров Олег Иванович** "Полимерные материалы на основе ненасыщенного поликетона, отверждаемого динитрилоксидом"
42. **Старчак Елена Евгеньевна** "Полимер-полимерные смеси сверхвысокомолекулярного и низкомолекулярного полиэтиленов: синтез и свойства"
43. **Боженко Константин Викторович** "Квантово-химическое исследование оксидов хрома"
44. **Громов Олег Игоревич** "Определение природы радикальных интермедиатов с использованием квантово-химического расчета спектральных параметров"
45. **Ковальчукова Ольга Владимировна** "Квантово-химическое моделирование строения и свойств азопроизводных метилфлороглуцина"
46. **Маматова Алина Артуровна** "Моделирование процесса адсорбции атомов тяжелых металлов на поверхности графена для биосенсорных приложений"
47. **Муратов Алексей Викторович** "DFT / GIAO расчет ЯМР ^1H и ^{13}C спектров 1,4-биарильных производных бензофуоро[1,2]дiazепинов"
48. **Туровский Николай Антонович** "Квантово-химическое моделирование реакции гомолиза трет-бутилгидропероксида"
49. **Гизатуллин Артур Расимович** "Влияние динитрозильных комплексов железа (доноров NO) на метаболизм кардиомиоцитов"

Вечерняя сессия

Нанохимия, нанофизика и нанотехнологии, высокомолекулярные соединения

Ведущий: член-корр. Озерин А.Н.

16.00 **Голубева Елена Николаевна** "Метод спиновых зондов для диагностики биосовместимых полимерных материалов, полученных в сверхкритическом диоксиде углерода"

16.30 **Емельянов Геннадий Анатольевич** "Металлополимерные композиции. Получение и свойства"

16.45 **Вдовиченко Артём Юрьевич** "Структура, оптические свойства и проводимость нанокompозитов поли-п-ксилилен - Fe"

17.00 **Рузимурадов Олим Нарбекович** "Полимер-металлоксидные нанокompозиты: синтез, свойства и применение в экоинженерии"

17.15 Перерыв

17.20 **Бревнов Петр Николаевич** "Композиционные материалы на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена и резинового наполнителя"

17.35 **Демина Варвара Анатольевна** "Биоразлагаемые композиционные материалы на основе полилактида и фосфатов кальция для ортопедии"

17.50 **Валияхметова Алсу Мунировна** "Новые фотополимеризуемые амфифильные производные тиакаликс[4]арена, содержащие один/два фрагмента 10,12-пентакозадииневой кислоты"

18.05 **Никольский Виктор Михайлович** "Полимерный комплексообразующий сорбент высокой сорбционной емкости"

18.20 **Моронцев Александр Алексеевич** "Новый подход к синтезу сополимеров норборнена и бутадиена"

22 СЕНТЯБРЯ, СУББОТА

Утренняя сессия

Горение и взрыв

Ведущий: д.ф.-м.н. Медведев С.П.

9.00 **Дубовицкий Владимир Абрамович** "Кинетическая модель взрывного газообразования в мелкодисперсной конденсированной системе"

9.15 **Горшков Владимир Алексеевич** "О стадийности формирования фаз при синтезе оксинитридной керамики методами СВС - металлургии"

9.30 **Акопджанян Тигран Гагикович** "Получение оптически прозрачной керамики из СВС-порошков оксинитрида алюминия (AlON)"

9.45 **Тверьянович Юрий Станиславович** "Энергонасыщенные вещества: резонансная лазерная инициация и влияние нанодобавок"

10.00 **Кочетков Роман Александрович** "Закономерности горения порошковых и гранулированных смесей $Ti+xC$ ($0.5 < x < 1$) насыпной плотности в спутном потоке аргона и азота"

10.15 **Лисина Татьяна Геннадиевна** "Перколяционный фазовый переход в разбавленных гранулированных смесях $Ti+C$ в потоке газа"

10.30 Перерыв

10.40 **Кислов Владимир Михайлович** "Окислительная конверсия смол газификации древесины в горючий газ"

10.55 **Мееров Дмитрий Борисович** "Горение модельных борсодержащих составов на основе перхлората аммония"

11.10 **Голубев Владимир Константинович** "Решение задач термохимии и термодинамики детонации и горения энергетических материалов с применением программы Expro5 V6.04"

11.25 **Тереза Анатолий Михайлович** "Высокотемпературный пиролиз бензола"

11.40 **Зиборов Вадим Серафимович** "Развитие ключевых экспериментальных подходов для исследования фронта ударной волны в газах"

11.55 **Назарова Нина Владимировна** "Воспламенение ацетона за отраженными ударными волнами"

12.10 **Медведев Сергей Павлович** "Моделирование рабочего процесса поршневого двигателя при различных режимах сгорания, включая детонацию"

Вечерняя сессия

Фотохимия и радиационная химия

Ведущий: проф. Гордон Е.Б.

15.00 **Барачевский Валерий Александрович** "Инновации в фотохромизме органических систем"

15.30 **Тихонов Геннадий Викторович** "Жидкие активные среды для высокоэнергетических лазеров: проблемы и перспективы"

15.45 **Кузьмин Владимир Александрович** "Процессы супертушения флуоресценции комплексов красителей с биомакромолекулами наночастицами и полиакрилатом золота"

16.00 **Лукин Леонид Викторович** "Поляризация электрон-дырочных пар в экспериментах по терагерцевой спектроскопии органических полупроводников"

16.15 **Лаврик Николай Львович** "Определение интенсивности спектров флуоресценции компонентов бинарного раствора в условиях перекрытия их спектров"

16.30 Перерыв

16.40 **Кузьмин Владимир Александрович** "Процессы комплексообразования полиметиновых красителей с двумя сопряженными хромофорами с биомакромолекулами и механизмы фотохимических процессов"

16.55 **Костюков Алексей Александрович** "Спектрально-кинетические характеристики комплексов бискарбоданинового красителя с сывороточным альбумином"

17.10 **Никольский Виктор Михайлович** "Деграция комплексонов, производных янтарной кислоты, под действием УФ излучения"

17.25 **Иванов Анатолий Иванович** "Проявление флуктуаций среды в нарушении симметрии в возбужденных квадрупольных молекулах "

17.40 **Товстун Сергей Александрович** "Термодинамическое соотношение для фотолюминесценции"

17.55 **Гадомская Анна Владимировна** "Фотолюминесценция диарилэтиленов: конформационная изомерия и выполнимость соотношения Кеннарда"

18.10 **Ковалев Иван Дмитриевич** "Высокотемпературная рентгенография для исследования структуры и стабильности нанокристаллических материалов"

23 СЕНТЯБРЯ, ВОСКРЕСЕНЬЕ

Утренняя сессия

10.00 Стендовая сессия № 3 (горение и взрыв, кинетика и динамика химических реакций, фотохимия и радиационная химия, химическая радиоспектроскопия, элементарные процессы)

1. **Голубев Владимир Константинович** "Физико-химические, молекулярные и детонационные свойства 5,5'-бис(1Н-тетразолил)амин и некоторых его производных"

2. **Зюзин Игорь Николаевич** "Термохимические и энергетические характеристики N-(2,2-бис(метокси-NNO-азокси)этил)нитрамино"

3. **Коптелов Александр Александрович** "Расчет индукционного периода теплового взрыва энергетических материалов по данным ДСК высокого давления"

4. **Милосердов Павел Александрович** "СВС-металлургия титано-хромового бориды из смесей на основе хромата кальция"

5. **Михалкин Виктор Николаевич** "Горение в свободном газовом заряде после распада детонации"

6. **Родионов Алексей Игоревич** "Кластер кристаллизационных установок для выращивания водорастворимых кристаллов"

7. **Родионов Алексей Игоревич** "Исследование проникновения пламени разбавленной метано-кислородной смеси через препятствия, содержащие палладий"

8. **Герновая Ольга Николаевна** "Численное и экспериментальное исследование поступательной неравновесности и влияния малых добавок Хе на порог детонации смеси O₂-H₂-He"

9. **Аникин Олег Викторович** "Влияние давления, температуры и растворителей на скорость реакции [2+2]-циклоприсоединения 3,4-дигидро-2Н-пирана с тетрацианоэтиленом и 4-фенил-1,2,4-триазаолин-3,5-дионом"
10. **Бегларян Айк Александрович** "Образование силикатов стронция в зависимости от времени синтеза с применением гидросиликагеля, полученного из серпентиновых минералов"
11. **Бегларян Айк Александрович** "Изучение формирования силикатов бария, синтезированных с использованием гидросиликагеля, полученного из серпентиновых минералов"
12. **Варфоломеева Вера Васильевна** "Изменение энергетического профиля реакции хлорангидридов карбоновых кислот со спиртами на границе раздела фаз"
13. **Волкова Нина Николаевна** "Изменение структуры монокристаллов 1,1-диамино-2,2-динитроэтилена (FOX-7) в процессе термических превращений в условиях непрерывного вакуумирования"
14. **Захаров Виктор Владимирович** "Изучение термического разложения 2,4-бис(диметиламино)-6-тринитрометил-1,3,5-триазина методами ДСК и масс-спектрометрии"
15. **Корнилов Дмитрий Анатольевич** "Еновый синтез 4-фенил-1,2,4-триазаолин-3,5-диола с β -пиненом и 2-кареном: влияние температуры, высокого давления и растворителей"
16. **Корнилов Дмитрий Анатольевич** "Температурные коэффициенты объемных изменений изополярных реакций первого и второго порядка в жидкой фазе"
17. **Панкина Галина Викторовна** "Влияние структурных свойств носителя Fe - содержащих катализаторов синтеза Фишера-Тропша (СФТ) на динамику топочимических процессов с участием синтез-газа."
18. **Султанова Алия Адиповна** "Адаптация модели Хьюи-Хамелека для процесса полимеризации метилметакрилата в массе "
19. **Шадрин Геннадий Константинович** "Разработка математической модели процесса обжига отработанного активированного угля"
20. **Шадрин Геннадий Константинович** "Управление химическим процессом посредством его обратной математической модели"
21. **Будыка Михаил Федорович** "Фотохимические свойства мероцианин-нафтольной диады"
22. **Василюк Геннадий Тимофеевич** "Структура и колебательные спектры фотохромных индолиновых спиропиранов в твердофазных пленках"
23. **Ли Виталий Моисеевич** "Спектральные и фотохимические свойства 8-алкоксипроизводных 2-стирилхинолина"
24. **Маслов Дмитрий Александрович** "Каталитические свойства BiOx/TiO_2 фотоэлектродов с разной концентрацией Bi - ионов"
25. **Поташова Наталья Игоревна** "Сравнительное исследование реакции [2+2]фотоциклоприсоединения в двух стирилбензохинолиновых диадах, образующих циклобутаны с вицинальными бензохинолиновыми заместителями"

26. **Поташова Наталья Игоревна** "Синтез и фотохимические свойства несимметричной диады, в которой два стирилбензохинолиновых фотохрома связаны с 2,3-нафтиленовым "каркасом" мостиками разной длины"
27. **Лаврик Николай Львович** "Исследование влияния фуллерена C₆₀ на ИК-спектр атактического полиметилметакрилата"
28. **Лаврик Николай Львович** "Исследование влияния фуллерена C₆₀ на кристаллические свойства полиэтилена низкой плотности методом ИК спектроскопии"
29. **Лаврик Николай Львович** "Изучение взаимодействия 4-хлорметил-1,3-диоксолана с алифатическими спиртами методом ИК спектроскопии"
30. **Пчёлкин Василий Петрович** "Шкала полярности липидов согласно элюирующей силе растворителя"
31. **Рабенок Евгения Витальевна** "Особенности процесса гибели фотогенерированных носителей тока в медь-дефицитных твердых растворах Cu_{1-x}(In_{0.7}Ga_{0.3})Se₂"
32. **Рабенок Евгения Витальевна** "Синтез и исследования электрофизических свойств в крупнокристаллических монокристаллических порошках Cu_{1.5}Zn_{1.15}Sn_{0.85}Se₄ и Cu_{1.5}Zn_{1.15}Sn_{0.85}S₄"
33. **Родионов Алексей Игоревич** "Изучение прохождения УФ-С излучения через атмосферу"
34. **Хатымов Рустем Владиславович** "Физико-химические характеристики изолированных отрицательных ионов конденсированного производного трихиноила по данным масс-спектрометрии резонансного захвата электронов"
35. **Хатымов Рустем Владиславович** "Фрагментация молекул гистидина в резонансных электрон индуцированных реакциях"
36. **Хатымова Ляйсан Зявдатовна** "Устойчивость молекул аза-производных полициклических ароматических углеводородов в свете низкоэнергетических электронно-молекулярных столкновений"
37. **Цеплин Евгений Евгеньевич** "Орбитальный подход при объяснении механизма специфического эффекта полярного растворителя в спектрах оптического поглощения"
38. **Цеплина Светлана Николаевна** "Влияние полярного растворителя на полосы поглощения изомеров хлорфенола"
39. **Губайдуллин Ирек Марсович** "Многоцелевая оптимизация условий проведения одно и много циклического производства для реакции диметолкарбоната со спиртами на основе кинетической модели"
40. **Голубков Геннадий Валентинович** "Температура электронов в атмосферном слое 80-110 км"
41. **Голубков Максим Геннадьевич** "Процесс I-перемешивания ридберговских молекул азота в собственном газе"
42. **Кирман Марина Викторовна** "Диаграмма кривых перемагничивания первого порядка молекулярного магнетика K_{0.4}[Cr(CN)₆][Mn(R/S)-pn](R/S)-pnH_{0.6}"
43. **Куницына Екатерина Игоревна** "Точки компенсации в тонких пленках GdFeCo"

44. **Львова Галина Львовна** "Спонтанные колебания намагниченности макроспина в синтетических антиферромагнетиках Pt/Co/Ir/Co/Pt с перпендикулярной анизотропией"

Вечерняя сессия

Химическая физика поверхности, элементарные процессы

Ведущий: проф. Шуб Б.Р.

16.00 **Вайнер Борис Григорьевич** "Инфракрасная термография нового поколения как метод анализа поверхности высокодисперсных твердотельных структур"

16.40 **Карпушин Александр Александрович** "Электронная структура оксида и нитрида кремния переменного состава"

16.55 **Тухбатуллин Адис Анисович** "Соносцинтилляционная активация люминесценции суспензий солей лантанидов в бензоле, толуоле и п-ксилоле"

17.10 **Вайнер Борис Григорьевич** "Изучение сорбционных свойств поверхности Со- и Се-содержащих цеолитов тепловизионным методом высокого разрешения"

17.25 Перерыв

17.30 **Басалаев Алексей Алексеевич** "Фрагментация ионов биологически значимых молекул"

17.45 **Ершов Кирилл Сергеевич** "Получение атомов титана и вольфрама и их оксидов в молекулярном пучке"

18.00 **Хатымова Ляйсан Зявдатовна** "Долгоживущие отрицательные молекулярные ионы, нестабильные относительно первого триплета"

18.15 **Хвостенко Ольга Григорьевна** "Электронно-возбужденные фешбаховские резонансы при резонансном захвате электронов молекулами"

18.30 **Карелин Александр Иосафович** "Теория Аррениуса и закон Рауля - что общего?"

24 СЕНТЯБРЯ, ПОНЕДЕЛЬНИК

Утренняя сессия

Гомогенный и гетерогенный катализ

Ведущий: проф. Цодиков М.В.

9.00 **Ростовщикова Татьяна Николаевна** "Строение и свойства биметаллических катализаторов, полученных методом лазерного электродиспергирования"

9.20 **Флид Виталий Рафаилович** "Гидридные комплексы никеля и палладия в каталитических реакциях формирования и разрыва С-С-связи"

9.40 **Чистяков Андрей Валерьевич** "Превращение обводненных растворов этанола в присутствии цеолитсодержащего Pd-Zn/MFI/Al₂O₃ катализатора"

9.55 **Гаврилов Константин Николаевич** "Лиганды фосфитной природы с оксаламидной основой в асимметрическом металлокомплексном катализе"

10.10 Перерыв

10.20 **Чолач Александр Романович** "Структурные особенности активных центров в каталитическом синтезе аммиака на поверхности металлов, сплавов и кластеров"

10.35 **Шутилов Алексей Александрович** "Окисление 3-пиколина в никотиновую кислоту в условиях микроволнового нагрева на оксидных ванадий-титановых катализаторах"

10.50 **Покочуева Екатерина Васильевна** "Влияние метода приготовления катализаторов Rh/TiO₂ на усиление сигнала ЯМР в реакциях гидрирования ненасыщенных углеводородов параводородом"

11.05 **Ковальский Виктор Юрьевич** "Окислительный механизм окисления метана на феррильной группе [FeO]₂⁺ в цеолите ZSM-5"

Вечерняя сессия

Химическая физика поверхности, гомогенный и гетерогенный катализ

Ведущий: проф. Корчак В.Н.

16.00 **Матиева Зарета Муратовна** "Влияние условий постсинтетической обработки цеолита MFI на физико-химические и каталитические свойства в превращении диметилового эфира в углеводороды"

16.15 **Столяров Игорь Павлович** "Роль ионных пар в гидрировании алкенов и алкинов в растворах гетерометаллических карбоксилатных комплексов палладия"

16.30 **Чепайкин Евгений Григорьевич** "Гомогенное окисление алканов: дизайн каталитических систем, окислители, механизмы"

16.45 Перерыв

17.00 **Пашалиев Бекир Латифович** "Получение наночастиц оксида железа Fe₃O₄ и использование в роли катализатора в синтезе Фишера-Тропша"

17.15 **Сулейманова Самира Аббас** "Электроноакцепторные и электронодонорные свойства катализаторов на основе SiraI по данным ЭПР-спектроскопии адсорбированных молекул"

17.30 **Юнусов Мирахмад Пулатович** "Исследование адсорбентов очистки газов риформинга от HCl синтезированных на основе вторичного сырья"

25 СЕНТЯБРЯ, ВТОРНИК

Утренняя сессия

10.00 Стендовая сессия № 4 (гомогенный и гетерогенный катализ)

1. **Абрамова Дарья Сергеевна** "Синтез высших алифатических нитрилов путем термического крекинга n-алканов в присутствии нитратов"
2. **Арапова Ольга Владимировна** "Изучение превращения органической массы лигнина при микроволновом воздействии"
3. **Бабкин Юрий Алексеевич** "Влияние типа среды на показатели конверсии полипропилена и полиэтилена в процессах термического и каталитического крекинга"
4. **Гаврилов Владислав Константинович** "Бисдиамидофосфиты в палладиевом и родиевом энантиоселективном катализе "
5. **Гайтко Ольга Максимовна** "Сложные оксиды РЗЭ со структурой Pb_2SbO_6 - новые гетерогенные катализаторы в реакциях окисления CO "
6. **Герасимов Евгений Юрьевич** "Исследование формирования смешанных Mn-Co оксидов из перовскитов состава $LaCo_{1-x}Mn_xO_3$ "
7. **Дементьев Константин Игоревич** "Селективная деоксигенация продуктов на основе биомассы в реакции каталитического крекинга"
8. **Жарова Полина Александровна** "Превращение этанола в линейные альфа-спирты в присутствии медьсодержащих катализаторов"
9. **Жарова Полина Александровна** "Гетерогенно-каталитическая кросс-конденсация биоспиртов"
10. **Жарова Полина Александровна** "Кросс-конденсация биооксигенатов в присутствии Pt-Re/ Al_2O_3 катализатора"
11. **Жарова Полина Александровна** "Кросс-конденсация биооксигенатов в присутствии Pt-Sn/ Al_2O_3 катализатора"
12. **Зимарев Владислав Сергеевич** "Хиральные индукторы фосфитной природы на основе гидроксилсодержащих амидов"
13. **Зиядуллаев Одилжон Эгамбердиевич** "Роль катализатора в синтезе ацетиленовых спиртов на основе карбида кальция"
14. **Константинов Григорий Игоревич** "Применение гибридной мембранно-каталитической технологии в процессе получения ценных мономеров"
15. **Коробов Александр Исаакович** "Двумерные разбиения Пуассона-Вороного на квадратных решетках и их континуальные аналоги"
16. **Коробов Александр Исаакович** "Отравление в решеточной модели обратимого изменения формы островка нанесенного катализатора в условиях химической реакции"
17. **Насуллаев Хикматулло Абдулазизович** "Синтез эффективных катализаторов и адсорбентов для переработки жидкого и газообразного углеводородного сырья"

18. **Николаев Сергей Александрович** "Эффект размера активной фазы и природы носителя в катализе конверсии биооксигенатов на иммобилизованных частицах золота"
19. **Николаев Сергей Александрович** "Селективный гидрогенолиз глицерина в пропиленгликоль-1,2 на ультрадисперсных частицах меди"
20. **Паланков Тимур Ахметович** "Исследование методами колебательной спектроскопии изменений в процессе превращения лигнина под влиянием СВЧ-излучения"
21. **Паланков Тимур Ахметович** "Изучение каталитического крекинга ацетона и углеводов методом *in situ* ИК-Фурье спектроскопии"
22. **Парманов Аскар Басымович** "Гомогенно - каталитическое винилирование карбоновых кислот"
23. **Ромазанова Дарья Александровна** "Каталитический крекинг нефтяных фракций в присутствии соединений вольфрама, сформированных *in situ*"
24. **Рощупкина Дарья Алексеевна** "Превращение смешанного лигнина в синтез-газ при стимулировании микроволновым излучением"
25. **Уваров Валерий Иванович** "Разработка СВС мембраны для процесса дегидрирования бутенов в бутadiены"
26. **Фирсин Илья Дмитриевич** "Первый лиганд фосфитной природы для металлокатализа на основе псевдодипептида "
27. **Флид Виталий Рафаилович** "Молекулярный дизайн каталитических систем в реакциях с участием норборнадиена"
28. **Шилина Марина Ильинична** "Окисление монооксида углерода на Co-Se-модифицированных цеолитах"
29. **Эжжеленко Дарья Игоревна** "Влияние метода синтеза на активность Au-катализаторов конверсии этанола в бутанол-1"
30. **Дементьева Оксана Сергеевна** "Каталитические свойства Fe-содержащих суспензий для осуществления синтеза Фишера-Тропша в сларри-реакторе, промотированные щелочными металлами"
31. **Иванцов Михаил Иванович** "Новые железосодержащие композитные катализаторы синтеза Фишера-Тропша на основе целлюлозы"
32. **Норко Семен Иванович** "Наноразмерные каталитические суспензии на основе железа, обладающие пониженной селективностью по диоксиду углерода в синтезе Фишера-Тропша в сларри-реакторе"
33. **Пономарева Анна Константиновна** "Каталитические свойства низкоконцентрированных Fe-содержащих суспензий в синтезе углеводов по методу Фишера-Тропша в сларри-системе"
34. **Чудакова Мария Владимировна** "Формирование Cu-Co-содержащих каталитических суспензий для получения оксигенатов из синтез-газа"
35. **Сагарадзе Александр Дмитриевич** "Синтез олефинов из продуктов синтеза Фишера-Тропша в присутствии цеолитсодержащих катализаторов"
36. **Смирнов Андрей Анатольевич** "Исследование NiCr-SiO₂ катализаторов на стабильность и активность в гидрировании модельного соединения бионефти – анизол"

Вечерняя сессия

16.00 Круглый стол

26 СЕНТЯБРЯ, СРЕДА

Утренняя сессия

10.00 Закрытие Симпозиума

27 СЕНТЯБРЯ, ЧЕТВЕРГ

Отъезд участников

Лекции

Инновации в фотохромизме органических систем

Барачевский В.А.

Центр фотохимии РАН ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Представлен обзор новых направлений применения и достигнутых в них результатов разработки фотохромных систем и материалов на основе органических соединений. Особое внимание уделено созданию материалов для оптоэлектроники, информационной и нанотехнологий, а также разработке тканевых материалов для одежды и камуфляжных покрытий. Показано, что активные усилия прилагаются в области применения фотохромных соединений в биологии и медицине.

Ядерно-магнитный контроль раковых клеток

Бучаченко А.Л.^{1,2,3}

1. Институт химической физики РАН;
2. Научный центр РАН в Черноголовке;
3. Московский университет; Ярославский университет

Синтез ДНК в клетках производят ДНК-полимеразы – ферменты, работа которых управляется ионами магния, кальция, цинка. Замена ионов $^{24}\text{Mg}^{2+}$, $^{40}\text{Ca}^{2+}$, $^{64}\text{Zn}^{2+}$ с немагнитными ядрами такими же ионами $^{25}\text{Mg}^{2+}$, $^{43}\text{Ca}^{2+}$, $^{67}\text{Zn}^{2+}$ с магнитными ядрами в 3–5 раз подавляет синтез ДНК. По этой причине ядерно-магнитные ионы убивают раковые клетки.

Инфракрасная термография нового поколения как метод анализа поверхности высокодисперсных твердотельных структур

Вайнер Б.Г.

ИФП СО РАН, НГУ, г. Новосибирск

Представлен обзор литературных материалов и оригинальных результатов, полученных автором и его коллегами, посвященных использованию современного метода инфракрасной термографии для экспериментального исследования сорбционно-каталитических процессов в высокодисперсных твердотельных системах при взаимодействии их поверхности с газами.

Метод спиновых зондов для диагностики биосовместимых полимерных материалов, полученных в сверхкритическом диоксиде углерода

Голубева Е.Н., Чумакова Н.А., Лунин В.В.
МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Лекция посвящена исследованию структуры и свойств различных полимерных форм (пленок, микрочастиц, вспененных образцов), полученных из D,L-полилактида в среде scCO_2 с одновременной импрегнацией биологически активными веществами, содержащими нитроксильный фрагмент.

Нанотехнологии и квантово-химическое моделирование в разработке трехмерной 3D флэш памяти нового поколения

Гриценко В.А.
ИФП им. А.В. Ржанова, СО РАН, Новосибирск

Представлен обзор современных нанометровых приборов флэш памяти. Анализируются $\text{TaN}(15\text{nm})\text{-Si}_3\text{N}_4(5\text{nm})\text{-SiO}_2(3.5\text{nm})\text{-Si(TANOS)3D}$ приборы флэш памяти терабитной емкости, флэш приборы на основе HfO_2 , Ta_2O_5 . Анализируется роль квантово-химического моделирования в разработке флэш памяти. Рассматривается флэш-память на графене и мультиграфене.

Молекулярное моделирование механизмов регуляции активности ферментов

Немухин А.В.^{1,2}, Коц Е.Д.^{1,2}, Варфоломеев С.Д.^{1,2}

1. Институт биохимической физики РАН, Москва
2. Московский государственный университет им. Ломоносова, Москва

Современные методы компьютерного моделирования регуляции активности ферментов, включая анализ элементарных стадий химических преобразований в многостадийных реакциях ферментативного катализа и эффекты аллостерического контроля, проиллюстрированы на примере аспартоцилазы человека.

Проблемы расчета поверхностного натяжения в трех-агрегатных системах

Товбин Ю.К.^{1,2}
1. ИОХН им. Н.С. Курнакова РАН, Москва
2. ГИЦ «НИФХИ им. Л.Я. Карпова», Москва

Впервые за 140 лет существования термодинамики Гиббса сформулирован единственно корректный способ расчета поверхностного натяжения

равновесных систем пар – жидкость по Гиббсу, который не зависит от кривизны границы раздела фаз, и обсуждаются условия его переноса на трех-агрегатные системы.

Моделирование сенсорных свойств и поглощения ультракоротких лазерных импульсов металлоксидными пленками

*Боднева В.Л.¹, Громов В.Ф.^{1,2}, Астапенко В.А.³, Сахно С.В.³, Иким М.И.¹,
Кожушнер М.А.^{1,3}, Посвянский В.С.¹, Трахтенберг Л.И.^{1,2,3}*

¹ИХФ РАН, Москва

²АО «Научно-исследовательский физико-химический институт имени Л.Я. Карпова», Москва

³Московский Физико-Технический Институт(ГУ), Долгопрудный

Развита теория сенсорного отклика на газы восстановители в наноструктурированных полупроводниковых оксидах. С использованием развитой модели, описывающей распределение электронов проводимости в полупроводниковой наночастице, построена кинетическая схема, неплохо описывающая экспериментальные данные. Также рассчитано сечение поглощения ультракоротких лазерных импульсов полупроводниковыми наночастицами и проведено сопоставление с экспериментальными данными.

Особенности топохимических реакций в наночастицах

Чернавский П.А.

Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва

Особенности топохимических реакций в наночастицах продемонстрированы на ряде примеров имеющих важное значение для процессов приготовления катализаторов, а также представляющих теоретический интерес.

Гетероструктуры на основе графена: реальность и перспективы

Чернозатонский Л.А., Артюх А. А., Демин В.А., Квашинин Д.Г.
Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля, Москва

Рассматриваются структуры и свойства материалов из молекулярно-связанных квази-двумерных слоев с участием графена, существующие разработки методов приготовления и элементов наноэлектроники и оптоэлектроники, а также перспективы их приложений.

Свойства оксида графита и мембран на его основе по данным спектроскопии ЭПР

Чумакова Н.А., Ребрикова А.Т., Воробьев А.Х., Коробов М.В.
МГУ, Москва

Метод спинового зонда впервые был применен для изучения систем «оксид графита – полярный растворитель» и мембран на основе оксида графита. Доказана высокая подвижность полярных жидкостей, сорбированных в межплоскостное пространство оксида графита. Охарактеризована ориентационная упорядоченность мембран.

Устные доклады

Получение оптически прозрачной керамики из СВС-порошков оксинитрида алюминия (AlON)

Акопджанян Т.Г.¹, Боровинская И.П.¹, Рупасов С.И.², Левашов Е.А.²

1. ИСМАН РАН, Черноголовка
2. НИТУ «МИСиС», Москва

Методом СВС получены однофазные порошки оксинитрида алюминия азотированием смеси Al/Al₂O₃ под высоким давлением азота. В смесь были добавлены избыток алюминия и перхлората магния (Mg(ClO₄)₂) и калия (KClO₄) для повышения температуры горения за счет реакции окисления. Высокотемпературным спеканием получена прозрачная керамика (до 25,5% светопропускания для образца 1,2мм).

Фрагментация ионов биологически значимых молекул.

Басалаев А.А.¹, Кузьмичев В.В.^{1,2}, Панов М.Н.¹, Смирнов О.В.¹

1. ФТИ им. А.Ф.Иоффе, Санкт-Петербург
2. СПбПУ им. Петра Великого, Санкт-Петербург

Измерены методом масс-спектрометрии сечения различных каналов фрагментации находящихся в газовой фазе ионов протеиногенных аминокислот L-ряда - лейцина, метионина и триптофана, непротеиногенных изомеров этих же аминокислот D-ряда и норлейцина, дипетида – глицил-глицин, а также молекул оснований нуклеиновых кислот – урацила и аденина.

Неинвазивное исследование процессов фотоиндуцированной клеточной смерти с помощью голографической микроскопии

Белашов А.В.¹, Жихорева А.А.^{1,2}, Салова А.В.³, Беяева Т.Н.³, Корнилова Е.С.³, Семенова И.В.¹, Васютинский О.С.¹

1. ФТИ им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург
2. Университет ИТМО, Санкт-Петербург
3. Институт Цитологии РАН, Санкт-Петербург

В докладе представлены результаты мониторинга оптических и морфологических характеристик живых клеток линии HeLa после генерации в них активных форм кислорода с помощью фотосенсибилизатора Радахлорина.

Спинзависимые механизмы биологической ферментативной магниточувствительности.

Бердинский В.Л.¹, Летута У.Г.¹, Пен Шан², Ин Дачуан², Илангован Р.³

1. Оренбургский государственный университет, Оренбург, Россия,
2. Северозападный политехнический университет, Сиань, КНР,
3. Институт фундаментальной медицины, Мадрас, Индия

Докладывается квантовомеханическое теоретическое описание магнитных эффектов внутриклеточных ферментативных реакций, основанное на формализме спиновых матриц плотности. Предполагается, что спинзависимой стадией является перенос или смещение электронной плотности в активных сайтах ферментов. Показано, что магнитные и ядерноспиновые эффекты способны изменять скорости внутриклеточных ферментативных реакций.

Композиционные материалы на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена и резинового наполнителя

*Бревнов П.Н.¹, Гаврилов Ю.А.¹, Акульшин В.В.¹, Гринев В.В.¹,
Михеев П.В.², Красоткина И.А.¹, Голубев Е.К.³*

1. ИХФ РАН, Москва
2. МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва
3. ИСПМ РАН, Москва

Исследование свойств композиционных материалов на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена и порошка резины показало, что введение резинового наполнителя приводит к повышению устойчивости композиционных материалов к абразивному износу, а также повышает прочность клеевого соединения к различным материалам.

Квантовые точки перовскитов - будущее фотовольтаики

Бричкин С.Б.

ИПХФ РАН, г. Черноголовка

В настоящее время ККТ перовскитов $CsPbX_3$ считаются самыми перспективными материалами для фотовольтаических систем. Они достаточно дешевы и имеют отличные оптические и электрические свойства. В докладе обсуждаются их свойства, достоинства и недостатки, методы получения и перспективы практического применения.

Молекулярные модели графеновых квантовых точек

Будыка М.Ф.
ИПХФ РАН, Черноголовка

В докладе обобщены экспериментальные и расчетные данные по спектрам поглощения и излучения полициклических ароматических углеводородов, которые рассматриваются в качестве молекулярных моделей графеновых квантовых точек и, в отличие от последних, имеют атомарно точную структуру и воспроизводимые оптические свойства.

Изучение сорбционных свойств поверхности Со- и Се-содержащих цеолитов тепловизионным методом высокого разрешения

Вайнер Б.Г.^{1,2}, Ростовщикова Т.Н.³, Шепелин А.В.², Шилина М.И.³
1. ИФП СО РАН, г. Новосибирск
2. НГУ, г. Новосибирск
3. МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва

Матричное тепловидение высокого разрешения применено для изучения сорбционных свойств поверхности Со- и Се-содержащих цеолитов. При разных режимах на образцах разного состава исследована температурная динамика, вызванная адсорбцией и десорбцией молекул газа. Проведено сравнение с данными по конверсии СО в реакции окисления кислородом.

Новые фотополимеризуемые амфифильные производные тиакаликс[4]арена, содержащие один/два фрагмента 10,12-пентакозадииновой кислоты

*Валяхметова А.М.¹, Бурилов В.А.¹, Григорьев И.А.¹, Миронова Д.А.¹,
Султанова Э.Д.¹, Соловьева С.Е.^{1,2}, Антипин И.С.^{1,2}*
1. ФГАОУ ВО КФУ, Казань
2. ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань

Разработана синтетическая стратегия для широкой серии бифункциональных рецепторов на основе тиакаликс[4]арена, содержащих диацетиленовые и рецепторные группы. Изучена способность к самоорганизации, фотополимеризации полученных соединений, а также изучено влияние различных субстратов на полидиацетиленовую систему.

Структура, оптические свойства и проводимость нанокompозитов поли-п-ксилилен - Fe

Вдовиченко А.Ю.^{1,2}, Сахарутов Д.А.¹, Овешников Л.Н.^{1,3}, Завьялов С.А.¹, Орехов А.С.¹, Зубавичус Я.В.¹, Аронзон Б.А.^{1,3}, Чвалун С.Н.^{1,2}

1. НИЦ Курчатовский институт, Москва
2. Институт синтетических полимерных материалов РАН, Москва
3. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

Исследована структура, оптические свойства и частотная проводимость нанокompозитов поли-п-ксилилен-Fe, с 4 и 11 vol% Fe. Показано что транспорт носителей заряда осуществляется по прыжковому механизму с длиной прыжка около 3.5 нм, что соответствует межчастичным расстояниям.

Лиганды фосфитной природы с оксаламидной основой в асимметрическом металлокомплексном катализе

Гаврилов К.Н.¹, Гаврилов В.К.¹, Чучелкин И.В.¹, Гулюкина Н.С.²

1. РГУ имени С.А. Есенина, г. Рязань
2. Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва

Рассмотрено применение лигандов различной дентатности, располагающих оксаламидным мостиком, а также фосфорными центрами на основе (*S_a*)- или (*R_a*)-BINOL и (*S*)-2-[(ариламино)метил]пирролидинов, в асимметрических Pd-катализируемых реакциях аллильного замещения и десимметризации, а также в Rh-катализируемых реакциях гидрирования.

Фотолюминесценция диарилэтиленов: конформационная изомерия и выполнимость соотношения Кеннарда

Гадомская А.В.

ИПХФ РАН, г. Черноголовка

Проведена экспериментальная проверка термодинамического соотношения Кеннарда для фотолюминесцентных свойств диарилэтиленов, для которых спектр люминесценции зависит от длины волны, а обычные законы люминесценции, соответственно, не выполняются.

Адсорбция и взаимодействие водорода и кислорода на поверхности нанесенных наночастиц золота

Гатин А.К., Гришин М.В., Колченко Н.Н., Сарвадий С.Ю., Шуб Б.Р.

ИХФ РАН, Москва

Установлены локальные особенности протекания процессов адсорбции молекулярных водорода и кислорода на различных неэквивалентных участках

поверхности нанночастиц золота, нанесенных на высокоориентированный пиролитический графит.

Решение задач термохимии и термодинамики детонации и горения энергетических материалов с применением программы Expro5 V6.04

Голубев В.К.¹, Кюнзел М.²

1. Университет Людвиг-Максимилиана (ЛМУ), Мюнхен
2. Научно-исследовательский комплекс ОЗМ, Ближновеце

Приведены результаты большого числа расчетов задач термохимии и термодинамики детонации и горения энергетических материалов с применением программы Expro5 V6.04. Рассмотрены случаи идеальной и неидеальной детонации и процессы изобарного и изохорного горения. Кратко указаны структура и возможности используемой программы.

О стадийности формирования фаз при синтезе оксинитридной керамики методами СВС – металлургии.

Горшков В.А., Силяков С.Л., Юхвид В.И., Сачкова Н.В.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова Российской академии наук, г. Черноголовка

В работе изучен механизм стадийности формирования фаз на примере горения смесей термитного типа $Fe_2O_3/Al/AlN$ с использованием оригинальной методики остановки фронта горения. Показана определяющая роль стадийности процесса восстановления оксида железа (III) в ходе экзотермической реакции в режиме горения. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований №16-08-00499.

Биоразлагаемые композиционные материалы на основе полилактида и фосфатов кальция для ортопедии

Демина В.А.^{1,2}, Седуш Н.Г.^{1,2}, Бузин А.И.^{1,2}, Крашенинников С.В.¹, Чвалун С.Н.^{1,2}

1 - НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва

2 – ИСПМ РАН, г. Москва

В работе изучено влияние введения наполнителя на теплофизические свойства, надмолекулярную структуру и физико- механические характеристики

композиционного материала. Исследована биосовместимость и деградация полученных материалов *in vivo*.

DFT-моделирование адсорбции водорода на интерфейсе наночастицы золота и графита

Дохликова Н.В., Колченко Н.Н., Гришин М.В., Гатин А.К., Шуб Б.Р.
ИХФ РАН, Москва

С помощью квантово-химического моделирование в рамках теории DFT на примере адсорбции водорода на суперкластере Au₁₃C₁₃₈, показано, что плотность состояний вблизи уровня Ферми наиболее заметно снижается в случае адсорбции на интерфейсе золото-углерод, что соответствует данным эксперимента.

Кинетическая модель взрывного газообразования в мелкодисперсной конденсированной системе

Дубовицкий В.А., Барелко В.В., Андрианова З.С., Гак Л.Н.
ИПХФ РАН, г. Черноголовка

Рассмотрена многокомпонентная кинетическая модель, описывающая гомогенную систему веществ в мелкодисперсном конденсированном и газообразном состоянии, принимающую поток тепла. Модель воспроизводит наблюдаемые взрывные процессы при движении фрагментированного метеорита в атмосфере, электровзрыв проводника.

Динамика возбужденных состояний циклических гетероатомных молекул

*Дьяков Ю.А.^{1,2}, Трахтенберг Л.И.^{2,3}, Голубков М.Г.³, Толиаутас С.⁴,
Валкунас Л.^{4,5}*

1. Genomics Research Center, Academia Sinica, 128 Academia Road, Sect. 2, Taipei 115 Taiwan
2. НИФХИ им. Л.Я. Карпова, Москва
3. ИХФ РАН, Москва
4. Institute of Chemical Physics, Faculty of Physics, Vilnius University, Sauletekio 9-III, 10222 Vilnius, Lithuania
5. Department of Molecular Compound Physics, Center for Physical Sciences and Technology, Sauletekio 3, 10257 Vilnius, Lithuania

В работе рассматриваются реакции фотодиссоциации электронно-возбужденных ароматических и неароматических циклических молекул. В

частности, сравниваются вероятности процессов распада молекул в возбужденных электронных состояниях, которые конкурируют с релаксацией на нижележащие уровни через конические пересечения.

Металлополимерные композиции. Получение и свойства.

Чернявский Г.Г., Кулаченков С.А., Емельянов Г.А., Меньшиков И.Н., Родин В.М.
ФГУП «НИИСК», Санкт-Петербург

Обсуждается перспективность применения новых дисперсных систем в качестве компонентов высокоэффективных магнито-реологических жидкостей, термоагрессивостойких покрытий и элементов конструкций, работающих в магнитном поле, а также других интересных технических решений.

Получение атомов титана и вольфрама и их оксидов в молекулярном пучке

Ершов К.С.^{1,2}, Кочубей С.А.³, Бакланов А.В.^{1,2}

1. НГУ, г. Новосибирск
2. ИХКГ СО РАН, г. Новосибирск
3. ИФП СО РАН, г. Новосибирск

Данная работа посвящена генерации атомов титана и вольфрама и их оксидов в молекулярном пучке при фотодиссоциации летучих соединений TiW , а также методом абляции. Кроме того, была попытка получить в условиях разряда новое стабильное вещество – пероксид титана.

Анализ гибели клеток рака яичников у крыс линии Wistar после химиотерапии методами цифровой голографической микроскопии

*Жихорева А.А.^{1,2}, Белашов А.В.^{1,2}, Беспалов В.Г.^{2,3}, Васютинский О.С.¹,
Жилинская Н.Т.³, Романов В.А.^{2,3}, Семенов А.Л.³, Семенова И.В.¹*

1. ФТИ им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург
2. Университет ИТМО, Санкт-Петербург
3. НИИ онкологии им. Н.Н. Петрова, Санкт-Петербург

В работе методами цифровой голографической микроскопии получены статистические распределения морфологических характеристик и оптической толщины клеток рака яичника крыс до и после химиотерапии различными препаратами. Анализ результатов позволяет судить об эффективности используемых препаратов.

Изучение механизмов деоксигенации сложных эфиров на Pt-Sn катализаторах методом функционала плотности

Завелев Д.Е.¹, Цодиков М.В.¹, Жидомиров Г.М.^{2,3}

1. ИНХС РАН, Москва
2. ИК СО РАН, Новосибирск
3. НИУ ВШЭ, физический факультет, Москва

Методом DFT изучен ряд возможных реакционных каналов деоксигенации сложных эфиров на Pt-Sn/Al₂O₃ катализаторах, содержащих наноразмерные фазы интерметаллидов. Получены структуры интермедиатов и переходных состояний, величины активационных барьеров. Выдвинуты гипотезы о роли активных центров катализатора.

Методика расчетов поверхностного натяжения в системе пар – жидкость

Зайцева Е.С.¹, Гвоздева Е.Е.¹, Рабинович А.Б.¹, Товбин Ю.К.^{1,2}

¹ГНЦ «НИФХИ им. Л.Я. Карпова», Москва

²ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

Разработана методика расчета поверхностного натяжения на базе модифицированной модели решеточного газа (ММРГ) системы пар – жидкость в строгом соответствии с термодинамическим определением, данным 140 лет назад Гиббсом для любой кривизны границы. ММРГ обеспечивает расчет распределений молекул в слоевой модели переходной области границы раздела фаз с учетом мягкости решеточной структуры и смещений центра масс молекул внутри ячейки.

Развитие ключевых экспериментальных подходов для исследования фронта ударной волны в газах.

Зиборов В.С., Галиуллин Р.А., Ефремов В.П., Шумова В.В., Фортон В.Е.
ОИВТ РАН, Москва

Структура фронта ударной волны и его радиационные свойства исследованы модифицированным лазерным шпирен методом и квази-трёхмерным многоканальным эмиссионным методом,

Проявление флуктуаций среды в нарушении симметрии в возбужденных квадрупольных молекулах

Иванов А.И.

Волгоградский государственный университет. г. Волгоград

Развита модель, описывающая эффекты флуктуаций среды в нарушении симметрии в возбужденных симметричных молекулах вида: A_L-D-A_R, где D –

донор электронов, A_L и A_R – идентичные акцепторы. Выполнен фитинг зависимости ширины полос характеристических колебаний, локализованных на разных акцепторах, от полярности растворителя. Работа поддержана грантом РФФИ № 16-13-10122

Структура и свойства нейтральных, заряженных и функционализированных кластеров платины и родия

Игнатов С.К.¹, Кожевин В.М.², Разуваев А.Г.¹

1. ННГУ, г. Нижний Новгород
2. ФТИ РАН, г. Санкт-Петербург

Изучены изменения структурных и энергетических характеристик кластеров платины и родия под влиянием изменений спина, заряда, нуклеарности и донорной способности лигандов, функционализирующих их поверхность. Исследование проведено методами DFT, эмпирических потенциалов и силового поля ReaxFF, калиброванных по результатам DFT.

Использование численного моделирования для определения констант скорости ряда реакций борорганических соединений.

Капралова Г.А., Чайкин А.М.
ИХФ РАН, Москва

Проведено численное моделирование процесса окисления метана воздухом в присутствии трихлорида бора. Впервые получены величины констант скорости ряда реакций, в которых участвуют борорганические соединения.

Теория Аррениуса и закон Рауля – что общего?

Карелин А.И.¹, Тарасенко В.А.²

1. ИПХФ РАН, Черногоровка
2. ФИНЭПХФ РАН, Черногоровка

Предложен способ определения равновесного состава водного раствора сильного электролита в широкой области аналитических концентраций на основе закона Рауля.

Электронная структура оксида и нитрида кремния переменного состава.

Карпушин А.А.¹, Гриценко В.А.^{1,2,3}

1. ИФП СО РАН г. Новосибирск
2. НГУ, г. Новосибирск
3. НГТУ, г. Новосибирск

В докладе представлены результаты расчета электронной структуры аморфных оксида и нитрида кремния переменного состава. Расчет проведен

методом сильной связи, в котором матричные элементы Гамильтониана сильной связи определялись с учетом изменения области локализации валентных электронов изолированных атомов при их встраивании в диэлектрик.

Реакции циклоприсоединения при высоком давлении: влияние давления на скорость и равновесие

*Киселев В.Д.
К(П)ФУ, Казань*

Рассмотрены данные о влиянии высокого давления и температуры на скорость реакций $(4\pi + 2\pi)$ -, $(2\pi + 2\pi + 2\pi)$ -, $(2\pi + 2\sigma + 2\sigma)$ -, $(2\pi + 2\pi)$ - циклоприсоединение и енового синтеза в широком диапазоне растворителей.

Окислительная конверсия смол газификации древесины в горючий газ

*Кислов В.М., Глазов С.В., Гончаров Е.А., Размыслов А.В., Пилипенко Е.Н.,
Салганская М.В.
ИПХФ РАН, г. Черноголовка,*

В лабораторных конверторах двух типов: полом и заполненным пористыми насадками (древесный уголь, цеолит ЦПС и кольца Рашига), проведена конверсия смол газификации древесины. Установлено, что в конверторах обоих типов теплота сгорания продуктов конверсии составляла от 3 до 4 МДж/м³, степень конверсии смол – до 80%.

Высокотемпературная рентгенография для исследования структуры и стабильности нанокристаллических материалов

Ковалев И.Д.¹, Шилкин С.П.², Ковалев Д.Ю.¹, Калинин Г.В.²
¹ ИСМАН, Черноголовка
² ИПХФ, Черноголовка

В работе получены данные по температурной зависимости параметров элементарной ячейки VB_2 и определены коэффициенты теплового расширения. Обнаружена анизотропия теплового расширения VB_2 вдоль кристаллографических осей. Установлены кинетические закономерности изменения размера ОКР в процессе нагрева.

Окислительный механизм окисления метана на феррильной группе $[\text{FeO}]^{2+}$ в цеолите ZSM-5

Ковальский В.Ю.¹, Шубин А.А.^{1,2}, Рузанкин С.Ф.¹, Зильберберг И.Л.^{1,2}

¹Институт катализа им. Борескова, Новосибирск

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск

Окисление метана частицами $[\text{Fe}=\text{O}]^{2+}$, в основном состоянии, имеющие феррильную конфигурацию $[\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}]^{2+}$, предваряется образованием окислительной конфигурации $[\text{Fe}^{\text{III}}-\text{O}]^{\bullet}$, энергия которой заметно понижается в катионно-обменной позиции цеолита, что способствует понижению барьера реакции окисления метана.

Возбуждение молекул в сильном электрическом поле, генерируемом при влете этих молекул в зазоры между металлическими наночастицам

*Кожевин В.М.¹, Ильющенко Д.С.¹, Горохов М.В.¹, Гуревич С.А.¹,
Ростовщикова Т.Н.²*

1. Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

2. Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

Проведен анализ основных эффектов, определяющих усиление электрического поля на молекулах при их осаждении на металлические наноструктуры. Определены условия, при которых напряженность электрического поля на молекулах, осажденных на структуры, сформированные методом лазерного электродиспергирования, становится сравнимой с атомными полями.

Влияние электронных и фотохимических процессов на вид вольт-фарадных характеристик структур «электролит-полупроводник», полученных методом фотостимулированной адсорбции

Козловский А.В., Стецюра С.В.

ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского», г. Саратов

Описано изменение вольт-фарадных характеристик структур, полученных послойной адсорбцией молекул фермента глюкозооксидазы в темноте и при освещении на Si. Показано, что величина и направление сдвига ВФХ при фотостимулированной адсорбции зависит от типа проводимости Si и освещения (грант РФФИ № 16-08- 00524_a).

Метод ион-молекулярных реакций в современной масс-спектрометрии

Костюкевич Ю.И., Николаев Е.Н.

Сколковский институт науки и технологий, Москва, Московская обл.

В докладе будут освещены результаты использования метода ион-молекулярных реакций с изотопно-мечеными соединениями для анализа белков (включая комплексы белок-белок), олигонуклеотидов, олигосахаридов, сложных молекулярных ансамблей (нефть, гуминовые кислоты, продукты гидротермального сжижения биомассы).

Спектрально-кинетические характеристики комплексов бискарбоцианинового красителя с сывороточным альбумином

*Костюков А.А.¹, Радченко А.Ш.¹, Местергази М.Г.^{1,2}, Кривелева А.С.²,
Подругина Т.А.², Штиль А.А.^{1,2}, Кузьмин В.А.¹*

¹ИБХФ РАН, Москва,

²МГУ, Москва

Исследованы процессы комплексообразования между молекулой бискарбоцианинового красителя и различными белками крови. Методом остановленной струи была изучена кинетика образования комплекса красителя и альбумина, установленатрехстадийная кинетикаобразования комплекса-диффузионная стадия и процессы изомеризации красителя.

Закономерности горения порошковых и гранулированных смесей $Ti+xC$ ($0.5 < x < 1$) насыпной плотности в спутном потоке аргона и азота

Кочетков Р.А., Сеплярский Б.С., Лисина Т.Г.
ИСМАН, Черноголовка

Полученные в работе результаты позволяют говорить о неравновесном механизме горения гранулированных смесей $Ti + xC$ в спутном потоке азота, когда последовательность химических реакций в волне горения определяется особенностями кинетики взаимодействия титана с азотом и углеродом.

Влияние условий синтеза на пирофорность и удельную поверхность наночастиц Ni

Алымов М.И., Сеплярский Б.С., Рубцов Н.М., Кочетков Р.А.
ИСМАН, Черноголовка

В работе показано, что при получении нанопорошка никеля путем разложения формиата никеля путем варьирования параметров синтеза возможно управление степенью пирофорности и размером получаемых частиц никеля. Дано объяснение различной пирофорности получаемых нанопорошков Ni в

зависимости от используемого при синтезе потока газа (аргон/водород). Также была установлена зависимость пирофорности и размера частиц Ni от толщины слоя исходного формиата никеля.

Процессы комплексообразования полиметиновых красителей с двумя сопряженными хромофорами с биомакромолекулами и механизмы фотохимических процессов

*Кузьмин В.А.¹, Костюков А.А.¹, Радченко А.Ш.¹, Шибаетова А.В.¹,
Королева О.А.¹, Местергази М.А.^{1,2}, Подругина Т.А.^{1,2}, Дорошенко И.А.^{1,2},
Некипелова Т.Д.¹*

¹ИБХФ РАН, Москва

²МГУ, Москва

Исследованы спектрально-кинетические характеристики промежуточных продуктов в фотохимических процессах бисхромофорных полиметиновых красителей и в их комплексах с альбумином. Фотоперенос электрона лежит в основе процесса фотосенсибилизированной дегградации белковых структур при фотодинамической терапии.

Процессы супертушения флуоресценции комплексов красителей с биомакромолекулами наночастицами и полиакрилатом золота

*Кузьмин В.А.¹, Радченко А.Ш.¹, Абзаева К.А.², Островская Л.А.¹,
Костюков А.А.¹, Шибаетова А.В.¹, Бирюкова Ю.К.¹, Погонин В.И.¹,
Морозов В.Н.¹, Некипелова Т.Д.¹, Корман Д.Б.¹*

¹ИБХФ РАН, Москва;

²ИрИХ СО РАН, Иркутск

Рассмотрены механизмы процессов тушения флуоресценции комплексов красителей с молекулами ДНК и альбумина наночастицами и полиакрилатом золота (динамическое и статическое тушение, модель сферы действия, образование мезофазы). Тушение флуоресценции обусловлено процессами переноса электрона и энергии.

Определение интенсивности спектров флуоресценции компонентов бинарного раствора в условиях перекрывания их спектров.

Лаврик Н.Л., Бажин Н.М.
ИХКГ СО РАН, Новосибирск

Получена точная аналитическая формула для получения корректных спектров флуоресценции компонентов бинарного раствора в условиях перекрывания их спектров с учётом эффектов внутреннего фильтра 1 и 2 рода. Корректность полученной формулы была экспериментально проверена для бинарных

растворов щелочных растворов гуминовой кислоты. В этих растворах флуоресцирующим компонентом I была щелочь NaOH (содержит флуоресцирующие примеси), а флуоресцирующим компонентом II гуминовая кислота «Алдрич».

Квантовая модель магнитомягкого деформированного ферромагнетика

Игнатьев В.К., Лебедев Н.Г., Орлов А.А., Перченко С.В.
ВолГУ, Волгоград

Предложена модель деформированного магнитомягкого ферромагнетика учитывающая зеемановское, диполь-дипольное взаимодействия локализованных электронов, а также взаимодействие с кристаллическим полем. Получены уравнения движения намагниченности одного домена ферромагнетика типа Ландау-Лифшица-Гильберта. Проведена серия экспериментов по изучению магнитомеханических эффектов, в которых показано количественное согласие модельных результатов с данными натурального эксперимента.

Эластопроводимость примесных графеновых нанолент

Лебедева О.С.¹, Лебедев Н.Г.¹, Лякосова И.А.²

1. ВолГУ, Волгоград
2. ВолГАУ, Волгоград

Исследованы эластопроводящие свойства примесных графеновых нанолент (ГНЛ) различной геометрической конфигурации и ширины, содержащих донорные и акцепторные примеси. Построена математическая модель зонной структуры примесных ГНЛ, деформированных растяжением (сжатием). Рассчитаны продольные компоненты M тензора эластопроводимости ГНЛ зигзагообразного, кресельного и смешанного типов. Проанализирована зависимость величины M от относительной деформации и концентрации дефектов.

Перколяционный фазовый переход в разбавленных гранулированных смесях Ti+C в потоке газа

Сеплярский Б.С., Кочетков Р.А., Лисина Т.Г.
ИСМАН, Черноголовка

В работе впервые исследовано влияние спутного потока активного и инертного газа на скорость и пределы горения гранулированной смеси Ti+С при разбавлении инертными гранулами корунда. Предсказаниям теории перколяции соответствуют измеренные значения концентрационных пределов горения, величина недогорания активной смеси Ti+С, отношение значений скоростей горения неразбавленной смеси и смеси на пределе распространения.

Моделирование композитных полимеров на основе полититаноксида и наночастиц золота. Квантовохимическое исследование

Логинова А.С., Игнатов С.К., Саломатина Е.В., Смирнова Л.А.
ННГУ им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород

Квантовохимическим методом исследованы структура и энергии образования структурных элементов нанокompозитов на основе $\text{TiO}_2/\text{HEMA}/\text{Au}$. Полученные результаты позволяют установить связь характерных структурных элементов нанокompозита с его наблюдаемыми спектральными характеристиками и условиями синтеза, что в перспективе дает возможность влияния на фотокаталитическую активность материала

Поляризация электрон-дырочных пар в экспериментах по терагерцевой спектроскопии органических полупроводников

Лукин Л.В.
Филиал ИНЭПХФ РАН им. В.Л. Тальрозе, Черноголовка

Рассматривается задача о движении электронов и дырок, генерированных лазерным импульсом в органическом полупроводнике, в электрическом поле второго импульса излучения в области частот 1 ТГц. Показано, что потери электромагнитной энергии второго импульса определяются поляризацией электрон-дырочных пар и их рекомбинацией.

Практическая реализация дефектно-примесной инженерии в микро- и нанотехнологии

Маковийчук М.И.
ЯФ ФТИАН РАН, Ярославль

Установлены преимущества использования дефектно-примесной фликкер-шумовой спектроскопии для информационного экспресс-анализа дефектно-примесного взаимодействия при реализации методов дефектно-примесной инженерии в микро- и нанотехнологии.

Влияние условий постсинтетической обработки цеолита MFI на физико-химические и каталитические свойства в превращении диметилового эфира в углеводороды

Матиева З.М., Курумов С.А., Снатенкова Ю.М., Колесниченко Н.В.
ИНХС им. А.В. Топчиева РАН, Москва

Изучено влияние способа постсинтетической обработки на свойства цеолитсодержащих катализаторов конверсии диметилового эфира в смесь углеводородов бензинового ряда. Физико-химическими методами

исследований показано, что щелочная, кислотная и термопаровая обработки цеолита H-ZSM-5 (мольное отношение $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3=35$) оказывают разное влияние на химический состав каркаса, текстурные и кислотные свойства цеолита и, следовательно, на селективность цеолитсодержащего катализатора по жидким углеводородам.

Моделирование рабочего процесса поршневого двигателя при различных режимах сгорания, включая детонацию

Черепанова Т.Т., Медведев С.П.
ИХФ РАН, Москва

В работе приведены результаты газодинамических расчетов, выявляющие особенности движения поршня в ДВС при сгорании топливной смеси в различных режимах – от распространения пламени до детонации. Анализ результатов расчетов показывает, что максимальное ускорение и скорость поршня наблюдаются при детонационном режиме сгорания. Эффективность детонационного режима, характеризуемая отношением скоростей поршня при детонационном и нормальном режиме работы, уменьшается с ростом длины его рабочего хода.

Горение модельных борсодержащих составов на основе перхлората аммония

Мееров Д.Б.¹, Муравьев Н.В.¹, Мельников И.Н.²
¹ИХФ РАН, Москва
²НИЯУ «МИФИ», Москва

В работе исследованы физико-химические характеристики образцов бора, полученных различными методами. Определены параметры горения модельных составов на основе ПХА и содержание активного бора в конденсированных продуктах сгорания.

Новый подход к синтезу сополимеров норборнена и бутадиена

*Моронцев А.А., Денисова Ю.И., Грингольц М.Л., Шандрюк Г.А.,
Кудрявцев Я.В., Финкельштейн Е.Ш.*
ИНХС РАН, Москва

Предложен новый подход к синтезу сополимеров норборнена (НБ) и бутадиена (БД) по реакции межцепного кросс-метатезиса между полинорборненом и полибутадиеном. Получены новые НБ-БД мультиблок-сополимеры с различной длиной блоков, изучены их термические и кристаллические свойства.

Воспламенения ацетона за отраженными ударными волнами.

Назарова Н.В.^{1,2}, Медведев С.П.¹, Смирнов В.Н.¹, Тереза А.М.¹
¹ИХФ РАН, Москва.
²НИЯУ «МИФИ», Москва.

Проведено экспериментальное и теоретическое изучение воспламенения стехиометрической смеси ацетона с кислородом в аргоне за отраженными ударными волнами.

Растворение полиаминогликанов в водных средах. Влияние кислотности среды и молекулярной массы полимера на кинетику растворения. Молекулярно-динамическое исследование

Наумов В.С., Игнатов С.К.
Нижегородский Государственный Университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород

Рассчитаны коэффициенты диффузии полимера, вязкость растворов хитозана, дана оценка влияния степени протонирования аминогрупп и молекулярной массы на кинетику растворения, изучено влияние водородных связей на растворение, рассчитаны вискозиметрические константы уравнения Марка-Куна-Хаувинка.

Математическое моделирование безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения в нанокластерах коллоидных квантовых точек

Невидимов А.В.¹, Кременец В.А.², Разумов В.Ф.^{1,2}
1. ИПХФ РАН, Черноголовка
2. ФФФХИ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

Работа посвящена изучению безызлучательного переноса энергии в нанокластерах коллоидных квантовых точек с помощью специально написанной компьютерной программы. Программа позволяет учесть полидисперстность квантовых точек, неоднородное уширение спектров индивидуальных частиц и другие факторы, влияющие на эффективность переноса энергии. Некоторые полученные зависимости подтверждены экспериментально.

Квантово-химическое моделирование адсорбции различных аминов на поверхности коллоидных квантовых точек CdSe и ZnS

Невидимов А.В., Невидимова А.Г., Разумов В.Ф.
ИПХФ РАН, Черноголовка

Работа посвящена квантово-химическому моделированию устойчивости комплексов различных аминов с коллоидными квантовыми точками селенида кадмия и сульфида цинка. На примере алкиламинов, фениламина, бензиламина и пиридина показано влияние типа амина на силу связывания аминов с поверхностью квантовой точки.

Деграляция комплексонов, производных янтарной кислоты, под действием УФ излучения

Никольский В.М.¹, Смирнова Т.И.², Новикова Л.А.¹

¹Тверской государственный университет, Тверь,

²Тверская государственная сельскохозяйственная академия, Тверь

Изучена степень деструкции комплексонов, производных янтарной кислоты (КПЯК), а именно: этилендиаминдиантарной – ЭДДЯК, иминодиантарной – ИДЯК, диаминциклогександиантарной – ДЦГДЯК, а также этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТА) под действием УФ излучения, установлен качественный состав продуктов их разложения.

Полимерный комплексообразующий сорбент высокой сорбционной емкости

Волчкова Е.С., Никольский В.М.

Тверской государственный университет, Тверь

Проблема увеличения сорбционной емкости комплексообразующих сорбентов по отношению к металлам решена путем увеличения денатности комплексообразующего агента прививкой к матрице сополимера стирола и дивинилбензола по аминогруппам двух молекул бромантарной кислоты с образованием пятиденатного лиганда - иминодиантарной кислоты.

Свойства стационарного уравнения Дирака в импульсном представлении и решение задачи об электроде в поле ядер молекулы

Новосадов Б.К.

ГЕОХИ РАН, г. Москва

Получено интегральное уравнение Дирака, в котором собственные функции кинематической матрицы Дирака использованы для преобразования уравнения к новому виду. Таким образом спиновая матрица электрона становится

множителем кулоновского ядра интегрального оператора, давая спиновую базисную систему для решения уравнения Дирака с потенциалом ядер молекулы. В итоге точное решение задачи оказывается линейной комбинацией атомных спиноров, предельным случаем которой является решение в виде ЛКАО нерелятивистского уравнения Шрёдингера, полученное автором в 1976 г. Приводятся расчеты термов для двух- и трехатомных молекул.

Аддитивность свойств соединений: квантовомеханическая интерпретация

Орлов М.Ю.¹, Туровцев В.В.², Орлов Ю.Д.¹

¹ Тверской государственный университет, г. Тверь

² Тверской государственный медицинский университет, г. Тверь

Рассмотрены результаты работ, в которых на основании расчетов количественных характеристик электронного строения соединений в рамках «квантовой теории атомов в молекуле» сформулированы правила построения аддитивно-групповых моделей и дана квантовая интерпретация классических понятий индуктивного и стерического эффектов.

Получение наночастиц оксида железа Fe₃O₄ и использование в роли катализатора в синтезе Фишера-Тропша

Пашалиев Б.Л.¹, Горшкова М.Ю.², Дементьева О.С.³

1. МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

2. ИНХС РАН, Москва

3. ИНХС РАН, Москва

Синтезированы наночастицы Fe₃O₄ методом химического соосаждения, которые охарактеризованы методами РФА и магнитометрии. Проведен синтез Фишера-Тропша с использованием полученных наночастиц в роли катализатора. Изучено влияние содержания Fe и метода получения катализаторов на закономерности протекания синтеза Фишера-Тропша. Получено, что с катализатором на основе наночастиц Fe₃O₄ синтезируется 75% легкой фракции и 43% олефинов.

Влияние метода приготовления катализаторов Rh/TiO₂ на усиление сигнала ЯМР в реакциях гидрирования ненасыщенных углеводородов параводородом

*Покочуева Е.В.^{1,2}, Буруева Д.Б.^{1,2}, Ковтунова Л.М.^{2,3}, Бухтияров В.И.³,
Ковтунов К.В.^{1,2}, Коптюг И.В.^{1,2}*

1. МТЦ СО РАН, Новосибирск

2. НГУ, Новосибирск

3. ИК СО РАН, Новосибирск

Работа посвящена исследованию катализаторов Rh/TiO₂ в реакциях гидрирования ненасыщенных углеводородов методами ЯМР и

индуцированной параводородом поляризации ядер (ИППЯ). Показано влияние метода приготовления катализатора на его активность и селективность к парному присоединению молекулярного водорода.

Смещение граничных размеров активности наночастиц

Рахимов Т.Х., Мухамедиев М.Г., Бекчанов Д.Ж.
Национальный университет Узбекистана, Ташкент

Изучено влияние природы матрицы-носителя на граничные размеры активных наночастиц в палладийсодержащих наносистемах на активированных углеродных волокнах. Показано, что природа носителя оказывает существенное влияние на граничные размеры активных фракций: у неоднородных матриц интервал активности значительно шире.

Устойчивость нефтей при их смешении по данным динамического рассеяния света

Рзаев Ю.Р.¹, Исмаилов Э.Г.²

1. Научно-Технический Центр «Шарг», Баку
2. Институт нефтехимических процессов НАН АР, Баку

С использованием метода динамического рассеяния света в сочетании с измерениями вязкости и плотности в интервале температур 278-333 К исследовано воздействие ПАВ на устойчивость нефтей ряда месторождений Азербайджана и их смесей. Приведены изменения количества и распределения по размеру частиц дисперсной нефтяной системы от концентрации и природы вводимого ПАВ.

Строение и свойства биметаллических катализаторов, полученных методом лазерного электродиспергирования

*Ростовщикова Т.Н.¹, Голубина Е.В.¹, Тарханова И.Г.¹, Брыждин А.А.¹,
Маслаков К.И.¹, Локтева Е.С.¹, Николаев С.А.¹, Кожевин В.М.²,
Гуревич С.А.², Явсин Д.А.²*

1. Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва
2. Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

Лазерное электродиспергирование сплава $Ni_{0.65}Pd_{0.35}$ или спрессованной смеси порошков $W_{0.70}Ni_{0.30}$ использовано для получения биметаллических «корочковых» катализаторов с равномерным распределением металлов в виде наночастиц на поверхности носителя. Такие катализаторы с чрезвычайно низким (0.005-0.007 вес. %) содержанием металла активны в реакциях гидрирования и окисления субстратов разной природы.

Полимер-металлоксидные наноконпозиты: синтез, свойства и применение в экоинженерии

Рузимурадов О.Н., Турсунбоев Ж., Абдукаюмов Х., Мусаев Х., Акбаров Х.И.
Туринский политехнический университет в г.Ташкенте, Ташкент

Наноконпозитные системы получены с использованием одностадийного золь-гель синтеза из многокомпонентных предшественников, состоящих из органической фазы (синтетические и / или природные полимеры), из неорганической фазы и структурно-направляющих агентов, необходимых для морфологического контроля. Наноструктурные материалы успешно применяются в фотокаталитической деградации вредных органических соединений.

Изучение вибронных взаимодействий в катионах органических молекул с участием нескольких электронных состояний

Скитневская А.Д.¹, Григоричева Э.К.¹, Трофимов А.Б.^{1,2}

1. ФГБОУ ВО ИГУ, Иркутск;
2. ИрИХ им. А.Е.Фаворского СО РАН, Иркутск

Вибронные взаимодействия трех низших состояний катион-радикалов пиридина и *цис*-1,2-дихлорэтилена рассмотрены с использованием формализма адиабатического вибронного гамильтониана. Получено отличное согласие с экспериментальными спектрами и интерпретирована их структура.

Фотоэлектронные процессы на границах раздела α -Si / Si и полиэлектродит / α -Si, определяющие эффективность адсорбции полиэлектродита

Стецюра С.В., Козловский А.В.
СГУ им. Н. Г. Чернышевского, Саратов

Показано, что тип c -Si под слоем α -Si и направление поля в области пространственного заряда на границе c -Si/ α -Si способствует преобладанию изолированных ловушек или их комплексов в α -Si, что определяет эффективность процессов фотостимулированной адсорбции полиэлектродитов на эту подложку (грант РФФИ № 16-08-00524_а).

Роль ионных пар в гидрировании алкенов и алкинов в растворах гетерометаллических карбоксилатных комплексов палладия

Столяров И.П.

ИОНХ РАН им. Н.С. Курнакова, Москва

Строение гетероядерных комплексов, в которых атомы металлов связаны между собой четырьмя карбоксилатными мостиками, в полярных растворителях не всегда сохраняется. Этим объясняется высокая каталитическая активность комплексов $\text{Pd}(\mu\text{-OAc})_4\text{MOAc}$ ($\text{M} = \text{Ga}, \text{In}$) и $\text{Pd}(\mu\text{-OAc})_4\text{M}$ ($\text{M} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) в реакциях гидрирования алкенов и алкинов.

Электроакцепторные и электронодонорные свойства катализаторов на основе *Siral* по данным ЭПР- спектроскопии адсорбированных молекул

Сулейманова С.А.¹, Османова С.Н.², Исмаилов Э.Г.¹

1. Институт нефтехимических процессов НАНА, Баку, Азербайджан
2. Институт катализа и неорганической химии, Баку, Азербайджан

Методом ЭПР -спектроскопии адсорбированных молекул дифениламина, нитробензола и нитроксидных радикалов определено количество и сила электронно-акцепторных (ЭА) и электронно-донорных (ЭД) центров на основе катализаторов *Siral* в зависимости от окислительно-восстановительного состояния катализатора.

Энергонасыщенные вещества: резонансная лазерная инициация и влияние нанодобавок

Тверьянович Ю.С.¹, Тверьянович А.С.¹, Илюшин М.А.², Аверьянов А.О.¹

¹ - СПбГУ, Санкт-Петербург

² - СПбГТИ, Санкт-Петербург

Рассмотрены работы по резонансному воздействию лазерного излучения на энергонасыщенные вещества как чистые, так и содержащие различные модифицирующие добавки наночастиц. Одним из объектов рассмотрения являются чистые и допированные наночастицами различных модификаций углерода нитротетрозолато-амминаты $\text{Co}(\text{III})$.

Высокотемпературный пиролиз бензола

Агафонов Г.Л., Василик Н.Я., Тереза А.М.

ИХФ РАН, Москва.

Проведено численное моделирование высокотемпературного пиролиза бензола с использованием наиболее известных ДКМ и дан анализ основных каналов, определяющих этот процесс.

Жидкие активные среды для высокоэнергетичных лазеров: проблемы и перспективы

Тихонов Г.В., Серёгина Е.А.
АО «ГНЦ РФ – ФЭИ», Обнинск

Представлены результаты исследования лазерно-активных жидкостей на основе неорганических апротонных растворителей $\text{POCl}_3\text{-MCl}_x$, $\text{SOCl}_2\text{-MCl}_x$ и $\text{SO}_2\text{Cl}_2\text{-GaCl}_3$ (MCl_x – кислота Льюиса), активированных Nd^{3+} и Yb^{3+} . Рассмотрены перспективы создания жидкостного лазера с диодной накачкой.

Термодинамическое соотношение для фотолюминесценции

Товстун С.А.
ИПХФ РАН, г. Черноголовка

Дано строгое термодинамическое доказательство и обобщение во временную область соотношения Кеннарда для матрицы возбуждения–люминесценции произвольного люминофора в состоянии термодинамического равновесия. Проведена экспериментальная проверка соотношения на наночастицах InP с оболочкой ZnS .

Влияние цинка на структуру и свойства катализаторов Pt/Mg(Zn)AlO_x , полученных на основе слоистых двойных гидроксидов

Трубина С.В.¹, Эренбург С.Б.^{1,2}, Бельская О.В.^{3,4}, Зайковский В.И.⁵, Лихолобов В.А.^{3,4}, Бухтияров В.И.⁵

1. ИНХ СО РАН, Новосибирск
2. ИЯФ СО РАН, Новосибирск
3. ИППУ СО РАН, Омск
4. Омский Государственный Технический Университет, Омск
5. ИК СО РАН, Новосибирск

На основе слоистых двойных гидроксидов были получены платиновые катализаторы некислотного типа Pt/Mg(Zn)AlO_x . С использованием методов ПЭМ, РФЭС, EXAFS исследован процесс формирования частиц нанесенной платины, ее дисперсность и электронное состояние

Модель расчета термодинамических свойств веществ в ангармоническом приближении

Туровцев В.В.^{1,2}, Емельяненко В.Н.³, Орлов Ю.Д.¹

1. ТвГУ, Тверь, Россия
2. ТвГМУ, Тверь, Россия
3. Университет г. Росток, Росток, Германия

Представлена модель расчета термодинамических свойств веществ в широком температурном интервале с учетом колебательного вклада в ангармоническом

приближении (RRAO). Рассмотрен способ представления колебательной энергии рядом Данхема. Проведено сопоставление моделей RRAO и RRHO («жесткий ротатор-гармонический осциллятор»).

Соноцинтилляционная активация люминесценции суспензий солей лантанидов в бензоле, толуоле и п-ксилоле

Тухбатуллин А.А.¹, Бурангулова Н.Ф.², Абдрахманов А.М.¹, Шарипов Г.Л.¹

¹Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа

²Башкирский государственный университет, г. Уфа

Проведено исследование во время сонолиза суспензий кристаллов солей лантанидов (сонотрибололюминесценция) в бензоле, толуоле и п-ксилоле, при этом, в УФ области спектра (260-320 нм) впервые зарегистрированы интенсивные полосы свечения молекул ароматических углеводородов. Показано, что при сонолизе этих суспензий образуются заряженные частицы, ответственные за возбуждения и участвующие в процессе механохимических реакций разложения углеводородов.

Новые амфифильные производные каликс[4]аренов с катионными и анионными головными группами: синтез и изучение агрегационных свойств.

*Фатыхова Г.А.¹, Макаров Е.Г.¹, Бурилов В.А.¹, Миронова Д.А.¹,
Антипин И.С.^{1,2}, Соловьева С.Е.^{1,2}*

1. ФГАОУ ВО «КФУ» Химический институт им. А.М. Бутлерова, г. Казань

2. ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, г. Казань

Получен ряд амфифильных производных каликс[4]аренов, содержащих заряженные фрагменты на верхнем ободе и гидрофобные алкильные заместители на нижнем ободе. Изучены агрегационные и рецепторные свойства полученных макроциклических соединений.

Гидридные комплексы никеля и палладия в каталитических реакциях формирования и разрыва С-С-связи

Флид В.Р., Шамсиев Р.С., Дураков С.А.

Российский технологический университет, МИТХТ им. М.В. Ломоносова,
Москва

Гидриды никеля и палладия обнаружены в реакциях циклодимеризации, аллилирования и гидроаллилирования норборнадиена в качестве вероятных интермедиатов. Теоретически и экспериментально изучены закономерности их формирования, направления гидридного переноса и каталитическое действие. Предложены непротиворечивые механизмы.

Радиационно-стимулированные процессы в гетерофазной фоточувствительной структуре под действием излучений различной природы

Стецюра С.В., Харитонова П.Г., Маляр И.В.
СГУ им. Н.Г. Чернышевского, Саратов

Показано, что повышение радиационной стойкости CdS на порядок происходит при создании на его поверхности наноразмерных включений PbS. Рассчитана необходимая плотность расположения включений PbS и пояснены механизмы возникновения радиационной стойкости фоточувствительного материала (грант РФФИ № 16-08-00524_a).

Электропроводность пленок, состоящих из наночастиц, без омических потерь

Коростелев Д.А., Сергеев В.О., Соколов А.А., Харламов В.Ф.
Орловский госуниверситет, г. Орел

Обнаружено: под действием электрического поля пленки, состоящие из насыщенных атомами водорода сферических наночастиц оксидов металлов, переходят в метастабильное состояние поляризации, в котором их дифференциальное электрическое сопротивление равно нулю при токе $J \geq 0$. Показано: это соответствует отсутствию омических потерь в пленках.

Долгоживущие отрицательные молекулярные ионы, нестабильные относительно первого триплета

Хатымова Л.З., Кинзябулатов Р.Р., Цеплина С.Н., Хвостенко О.Г.
ИФМК УФИЦ РАН, Уфа

На основе данных по основному и электронно-возбужденным состояниям материнской молекулы, образующей долгоживущие отрицательные молекулярные ионы при резонансном захвате электронов, энергии которых больше, чем энергия первого триплета, выдвинуто предположение, что задержка распада таких ионов обусловлена их электронным состоянием.

Электронно-возбужденные фешбаховские резонансы при резонансном захвате электронов молекулами

Хвостенко О.Г., Хатымова Л.З., Лукин В.Г., Цеплин Е.Е.
ИФМК УФИЦ РАН, Уфа

Показано, что при резонансном захвате медленных электронов ($E_{эл} = 0 - 15$ эВ) молекулами могут образовываться отрицательные ионы по механизму фешбаховского резонанса в большом интервале $E_{эл}$ включая $E_{эл} \sim 0$, что важно

для изучения долгоживущих ионов. Фотоэлектронная спектроскопия и расчеты использовались как вспомогательные методы.

Молекулярное моделирование флуоресцентных белков на основе флавина и его производных

Хренова М.Г.^{1,2}, Метелешко Ю.И.¹, Немухин А.В.^{1,3}

1. МГУ, химический факультет, Москва
2. ФИЦ Биотехнологии РАН, Москва
3. ИБХФ РАН, Москва

В докладе будут представлены результаты молекулярного моделирования флуоресцентных белков на основе флавина и поиска новых мутантных форм, обладающих спектрами поглощения и флуоресценции, отличающимися от уже изученных экспериментально вариантов.

Роль «геометрического фактора» в наблюдении углового распределения интенсивности критической опалесценции CO₂

Чайкина Ю.А.
ИХФ РАН, Москва

Показано, спекл - интерферометрия критической опалесценции может рассматриваться как прямое измерение характерного масштаба пространственных корреляционных эффектов в критическом CO₂.

Гомогенное окисление алканов: дизайн каталитических систем, окислители, механизмы

Чепайкин Е.Г.¹, Безрученко А.П.¹, Менчикова Г.Н.¹, Гехман А.Е.²

¹ИСМАН им. А.Г. Мержанова, Черноголовка

²ИОНХРАН им. Н.С. Курнакова, Москва

Парциальное окисление алканов в спирты, кетоны, кислоты до сих пор является актуальной проблемой катализа. Рассмотрены подходы к дизайну гомогенных каталитических систем, эффективные окислители и вероятные схемы механизмов.

Превращение обводненных растворов этанола в присутствии цеолитсодержащего Pd-Zn/MFI/Al₂O₃ катализатора

Чистяков А.В.^{1,2}, Жарова П.А.^{1,2}, Цодиков М.В.¹

1. ИНХС РАН, Москва
2. МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

Обнаружено, что этанол, содержащий 20-40 об.% воды в присутствии Pd-Zn/Al₂O₃/MFI катализатора превращается в алкановые и ароматические углеводороды, при этом заметно ингибируются нежелательные процессы крекинга и закоксовывания каталитической поверхности, что выражается в увеличении времени работы катализатора с 8-12 до 100 ч.

Структурные особенности активных центров в каталитическом синтезе аммиака на поверхности металлов, сплавов и кластеров

Чолач А.Р.

ИК СО РАН, Новосибирск

Наибольшая активность каталитического центра достигается лишь при его определенной координационной ненасыщенности. Активность «сильного» катализатора синтеза аммиака (Ru, Re) может быть повышена сплавлением с более «слабым» катализатором (Pt, Rh) за счет оптимизации структуры и термодинамических свойств активных центров на поверхности сплава.

Окисление 3-пиколина в никотиновую кислоту в условиях микроволнового нагрева на оксидных ванадий-титановых катализаторах

Шутилов А.А.^{1,2}, Алькаева Е.М.³, Зенковец Г.А.¹

1. ИК СО РАН, Новосибирск
2. НГТУ, Новосибирск
3. Fordham University, New York

Применение СВЧ-микроволнового нагрева в реакции гетерогенного окисления 3-пиколина в никотиновую кислоту (витамин В₃) на оксидных V-Ti-O катализаторах имеет ряд преимуществ, по сравнению с традиционным нагревом в электрической печи: увеличивается активность и селективность катализаторов, тратится меньше энергии и создается оптимальный температурный профиль в частицах катализатора, что обеспечивает положительный эффект для протекания реакции.

Кинетика спада быстрой флуоресценции в органических полупроводниках. Эффект миграции Т-экситонов.

Шушин А.И.

Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова РАН, Москва

Предложен анализ кинетики распада возбужденного синглетного состояния в органических полупроводниках с образованием пар триплетных экситонов. В анализе учтен эффект миграции Т-экситонов, как аморфных, так и упорядоченных полупроводниковых средах.

Исследование особенностей микроструктуры и электронного строения многослойных гетеросистем с квантовыми точками Ge/Si, легированными Mn

*Эренбург С.Б.^{1,2}, Трубина С.В.¹, Зиновьев В.А.³, Двуреченский А.В.³,
Кучинская П.А.³, Квашина К.О.^{4,5}*

1 ИНХ СО РАН, Новосибирск

2 ИЯФ СО РАН, Новосибирск

3 ИФП СО РАН, Новосибирск

4 ESRF, Grenoble, France

5 HZDR, Institute of Resource Ecology, Dresden, Germany

В рамках методов XAFS спектроскопии впервые проведен сравнительный анализ микроструктуры образцов разбавленных растворов Mn в квантовых точках Ge в кремниевой матрице, полученных в результате облучения ионами Mn^{+} и одновременной эпитаксией (МЛЭ). Из анализа спектров охарактеризовано присутствие Mn в первой сфере окружения Ge.

Исследование адсорбентов очистки газов риформинга от HCl синтезированных на основе вторичного сырья

Юнусов М.П., Сайидов У.Х., Насуллаев Х.А.

Узбекский научно-исследовательский химико-фармацевтический институт,
Ташкент, Узбекистан.

В настоящей работе исследован синтезированный отечественный адсорбент поглотителя HCl и других кислых газов, ориентированного на кондиционирование водородсодержащего газа риформинга – сырья для установки гидроочистки бензина и дизельного топлива на НПЗ.

Стендовые доклады

Синтез высших алифатических нитрилов путем термического крекинга н-алканов в присутствии нитратов

Абрамова Д.С.^{1,2}, Дементьев К.И.¹, Ромазанова Д.А.^{1,2}, Хаджиев С.Н.¹

1. ИНХС РАН, Москва

2. МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

В данной работе проведен синтез нанодисперсных алюмосодержащих суспензий с использованием нитрата алюминия в качестве прекурсора. Изучены количественный и качественный составы систем. Показано, что в процессе термического крекинга полученных систем происходит образование алифатических нитрилов. Работа выполнена за счет гранта РФФИ №17-73-30046

Термодинамические свойства водорастворимых ацетатов целлюлозы и их композиций

Акбаров Х.И.¹, Рахманбердиев Г.Р.²

1. Национальный университет Узбекистана им. Мирзо Улугбека

2. Ташкентский химико-технологический институт

Методом Тагера были рассчитаны средние свободные энергии смешения полимер-полимер Δg_x , значения которых для всех составов смесей ВРАЦ-коллаген отрицательны, что свидетельствует об их термодинамической устойчивости. Во всем изученном интервале составов параметр Флори-Скотта χ_{12s} принимает отрицательные значения, что является подтверждением совместимости компонентов и однородности системы ВРАЦ-коллаген.

Дендримерные поликатионные пептиды - эффективные генные транспортеры

Андреев С.М., Кожихова К.В., Шиловский И.П., Тимофеева А.В., Гайсина А.Р., Шатилов А.А., Хаитов М.Р.

ФГБУ "ГНЦ Институт иммунологии" ФМБА России, Москва

В качестве векторов-переносчиков генного материала синтезированы 20 пептидов длиной до 22 аминокислот, включая катионные линейные и дендримерные пептиды. Их активность оценивали путем трансфекции клеток 293Т плазмидами с репортерными генами LUC и GFP. Дендримерные пептиды демонстрировали наибольшую активность, особенно пептид LTR.

Влияние давления, температуры и растворителей на скорость реакции [2+2]-циклоприсоединения 3,4-дигидро-2Н-пирана с тетрацианоэтиленом и 4-фенил-1,2,4-триазаолин-3,5-дионом

Аникин О.В., Киселев В.Д., Корнилов Д.А., Шулятьев А.А.
К(П)ФУ, г. Казань

Данная работа представляет исследование о влиянии давления, температуры и растворителей на скорость реакции [2+2]-циклоприсоединения 3,4-дигидро-2Н-пирана с 4-фенил-1,2,4-триазаолин-3,5-дионом и тетрацианоэтиленом. Определены кинетические и термодинамические параметры для этих реакций.

Изучение превращения органической массы лигнина при микроволновом воздействии

Арапова О.В.¹, Паланкоев Т.А.¹, Рощупкина Д.А.², Цодиков М.В.¹
¹ИНХС РАН, Москва
²ИБМХ РАН, Москва

В настоящей работе представлены результаты по переработке лигнина при микроволновом облучении. Эффективное превращение крафт лигнина проводилось в присутствии Fe и Ni катализаторов для получения высокоценных ароматических спиртов и водородсодержащего газа.

Влияние типа среды на показатели конверсии полипропилена и полиэтилена в процессах термического и каталитического крекинга

Бабкин Ю.А., Дементьев К.И., Хаджиев С.Н.
ИНХС РАН, Москва.

Объектом исследования является изучение влияния типа среды при проведении термического и каталитического крекинга полиэтилена и полипропилена. По полученным результатам был сделан вывод о синергетическом эффекте среды и полимеров, а также о значительном влиянии С/Н растворителей на распределение продуктов реакции.

Молекулярная динамика полимеров на поверхности шунгита

Барашкова И.И.¹, Ясина Л.Л.¹, Вассерман Л.А.¹, Комова Н.Н.², Тарасов В.Ф.¹
1 ИХФ РАН им. Н.Н.Семенова, Москва
2 МТУ, Москва

Методом спинового зонда исследованы полимерные композиции на основе шунгита. Показано, что молекулы неполярных (СКЭПТ и НК) каучуков имеют заторможенный адсорбционный слой на поверхности наполнителя размером 2-

4 нм. Полярный каучук (СКХ) организуется на поверхности таким образом, что промежуточный слой не детектируется.

Образование силикатов стронция в зависимости от времени синтеза с применением гидросиликагеля, полученного из серпентиновых минералов

Бегларян А.А.^{1,2}, Зулумян Н.О.¹, Исаакян А.Р.¹, Меликян С.А.¹, Терзян А.М.¹

1. Институт общей и неорганической химии Национальной академии наук Республики Армения, Ереван

2. Ереванский государственный университет, Ереван

Перемешивание в течение 15 мин в условиях атмосферного давления кипящей водной суспензии, приготовленной из выделенного из серпентинов гидросиликагеля, NaOH и SrCl₂, оказывается достаточным для образования гидрата силиката стронция Sr₃Si₂O₇·3H₂O, который при нагреве до 700–750°C кристаллизуется Sr₂SiO₄.

Изучение формирования силикатов бария, синтезированных с использованием гидросиликагеля, полученного из серпентиновых минералов

Бегларян А.А.^{1,2}, Зулумян Н.О.¹, Исаакян А.Р.¹, Меликян С.А.¹, Терзян А.М.¹

1. Институт общей и неорганической химии Национальной академии наук Республики Армения, Ереван

2. Ереванский государственный университет, Ереван

Интермедианты, полученные перемешиванием в течение 15–120 мин в условиях атмосферного давления кипящей водной суспензии, приготовленной из выделенного из серпентинов гидросиликагеля, NaOH и BaCl₂, при нагреве до 800°C кристаллизуются в Ba₂SiO₄ и BaSiO₃. Наибольшее количество Ba₂SiO₄ образуется при получасовом синтезе.

Физико-химические характеристики анионита полученного на основе гранулированного пластикат поливинилхлорида

Жураев М.М., Кутлимуратов Н.М., Бекчанов Д.Ж., Мухамедиев М.Г.

Национальный университет Узбекистана им. Мирзо Улугбека

Взаимодействием гранулированного пластикат поливинилхлорида с полиэтиленполиамином синтезирован новый анионит. Определены его физико-химические параметры. Получены даны покажет что, синтезированный сорбент по своим показателям не уступает сорбенту АН-31.

Свойства сополимеров, полученных в сверхкритической среде

Беломоина Н.М., Булычева Е.Г., Чащин И.С.
ИНЭОС РАН, Москва

Реакцией полигетероциклизации на основе тетрааминов, бис(α -дикетонов) и бис(нафталевых ангидридов) в среде СК-СО₂ при 50-90°C, давлении 15 МПа в течение 8 ч при использовании катализатора - смеси бензойной кислоты с бензимидазолом был получен ряд сополифенилхиноксалино-нафтоиленбензимидазолов. Изучены некоторые свойства сополимеров.

Соединения соинтеркалирования нитрата графита – перспективные предшественники углеродных наночастиц

Берестнева Ю.В., Ракша Е.В., Вдовиченко А.Н., Савоськин М.В.
ГУ «ИНФОУ», г. Донецк

Осуществлен синтез соединений соинтеркалирования нитрата графита (ССНГ) с органическими соединениями и водой. Показана возможность регулирования силы межмолекулярных взаимодействий в образующихся структурах за счет варьирования природы и количества соинтеркалантов, что указывает на перспективность использования ССНГ в качестве исходного материала для получения углеродных наночастиц.

Энергетические эффекты при деформации низко кристаллических полиолефинов.

Бессонова Н.П.¹, Крашенинников С.В.¹, Щербина М.А.²

1. АО НИФХИ им. Л. Я. Карпова, Москва

2. ИСПМ РАН, Москва

Методом деформационной калориметрии, основанном на одновременной регистрации механических и тепловых эффектов, проведено исследование термодинамики одноосной деформации низко кристаллических сополимеров этилена с октенем. Установлено, что изменения внутренней энергии играют важную роль при деформации исследуемых сополимеров.

Квантово-химическое исследование оксидов хрома

Боженко К.В.¹, Гуцев Г.Л.², Алдошин С.М.¹, Гуцев Л.Г.³, Утенышев А.Н.¹

¹Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка

²Department of Physics, Florida A&M University, Tallahassee, Florida 32307, USA

³Department of Chemistry and Biochemistry, Florida State University, Tallahassee 32306, USA

Найдена геометрическая и электронная структура основных состояний кластеров Cr₂O_n и Cr₂O_n⁻, используя метод DFT с потенциалом GGA для 1 ≤ n

≤ 14 . Рассчитаны константы обменного взаимодействия, поляризуемости, энергии связи, приходящиеся на один атом, а также энергии отрыва атома О и молекулы О₂ для обеих серий вместе со сродством к электрону нейтралов и вертикальными энергиями отрыва электрона в анионах. Всего рассчитано более 500 структур.

Фотохимические свойства мероцианин-нафтольной диады

Будыка М.Ф., Поташова Н.И., Гавришова Т.Н.
ИПХФ РАН, Черноголовка

В бихромофорной диаде, содержащей нафтильную и мероцианиновую группы, наблюдается индуктивно-резонансный (ферстеровский) перенос энергии (FRET) от первой группы ко второй и *транс-цис* фотоизомеризация второй группы.

Синтез растворимого полинафтоиленбензимидазола на основе 1,3-бис(3,4-диаминофенокс)бензола и диангибрида 1,3-бис-(1,8-дикарбоксии-нафтоил-4)бензола

Бужин М.И., Булычева Е.Г., Беломоина Н.М., Никифорова Г.Г., Васильев В.Г.
ИНЭОС РАН, Г. МОСКВА

Нами осуществлен синтез полинафтоиленбензимидазола, на основе 1,3-бис(3,4-диаминофенокс)бензола и диангибрида 1,3-бис-(1,8-дикарбоксии-нафтоил-4)бензола. Полимер растворим в смеси тетрачлорэтан: фенол и обладает пленкообразующей способностью.

Иономерные полифенилхиноксалины и их комплексы с поверхностно-активным веществом.

Булычёва Е.Г.¹, Беломоина Н.М.¹, Васильев В.Г.¹, Вассерман Л.А.²

1. ИНЭОС РАН, Москва
2. ИБФХ РАН, Москва

Получение комплексов полимер–ПАВ является еще одним способом модификации полифенилхиноксалинов. Их образование подтверждено данными ИК-спектроскопии. На определенные конформационные изменения комплекса полимер–ПАВ указывают результаты измерения размера и распределения частиц в растворах.

Протонопроводящие мембраны на основе модифицированных сульфированных полифенилхиноксалинов.

Булычёва Е.Г.¹, Беломоина Н.М.¹, Васильев В.Г.¹, Hsu S. L-C²

1. ИНЭОС РАН, Москва
2. Национальный Ченг-Кунг Университет, Тайнань, Тайвань.

Изучены сульфированные полифенилхиноксалины в качестве протонопроводящих мембран. Установлено, что введение монтмориллонита улучшает механические и термические характеристики нанокompозитных мембран после допирования. Степень допирования достигала 192%, а протонная проводимость при 180⁰С - $4,7 \cdot 10^{-2}$ См·см⁻¹.

Исследование самоассоциации антибиотика топотекана в водном растворе методом ЯМР-диффузометрии

Бучельников А.С.¹, Яковлева Ю.А.², Ельцов О.С.², Сало В.А.³, Евстигнеев М.П.³

1. ФГБОУ ВО “СПбГУ”, г. Санкт-Петербург
2. ФГАОУ ВО “УрФУ”, г. Екатеринбург
3. ФГАОУ ВО “СевГУ”, г. Севастополь

Количественный анализ самоассоциации антибиотика топотекана был выполнен с помощью метода ЯМР-диффузометрии. Рассчитанное по статистико-термодинамической SHIM-модели значение равновесной константы самоассоциации незначительно отличается от известного значения, полученного с помощью другого экспериментального метода.

Изменение энергетического профиля реакции хлорангидридов карбоновых кислот со спиртами на границе раздела фаз

Варфоломеева В.В., Терентьев А.В.
Самарский университет

В работе показан путь реакции в системе «хлорангидрид – спирт», когда образуются менее энергозатратные промежуточные соединения, образование и стабилизация которых осуществляется посредством водородных связей. Значения реакционных барьеров рассчитаны методом B3LYP/aug-cc-pVDZ.

Структура и колебательные спектры фотохромных индолиновых спиропиранов в твердофазных пленках

Василюк Г.Т.¹, Карпач П.В.¹, Маскевич С.А.², Лукьянов Б.С.³

1. Гродненский государственный университет имени Я.Купалы, Гродно, Беларусь

2. Международный государственный экологический институт имени А.Д.Сахарова БГУ, Минск, Беларусь
3. Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Методами спектроскопии инфракрасного (ИК) поглощения, спектрофотометрии и квантовой химии изучены структура и фотохромные превращения индолиновых спиропиранов в твердофазных пленках.

Структурные и термодинамические свойства кукурузного крахмала, подвергнутого ферментативному гидролизу глюкоамилазой

Вассерман Л.А.¹, Кривандин А.В.¹, Тарасов В.Ф.³

¹ Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва

² Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва

Различными физико-химическими методами установлено, что морфология крахмалов мало меняется со степенью гидролиза вплоть до 50%. Более существенные изменения наступают в условиях, когда уменьшение размеров крахмальных ламелей вследствие гидролиза становится сопоставимым с их ростом вследствие термического отжига.

Исследование фармакокинетики нового производного тиазолидин-2,4-диона в составе топической лекарственной формы

Веденкин А.С., Киселёв А.В., Левшин И.Б., Стовбун С.В.
ИХФ РАН, Москва

Лекарственный препарат на основе нового производного тиазолидин-2,4-диона разрабатывается в качестве противогрибкового средства для местного применения. Определение фармакокинетических параметров ЛС в плазме крови и коже кроликов и крыс проводили методом ВЭЖХ-УФ. Показано, что после кожного нанесения препарат активно абсорбируется в кожу, достигая максимальных концентраций спустя 0,5 часа, и постепенно элиминируется из нее (период полувыведения составил 7,46 часа)

Температурная зависимость магнитосопротивления в модифицированном графене

Волков В.Т., Кононенко О.В., Зотов А.В., Матвеев В.Н., Левашов В.И.
ИПТМ РАН, г. Черноголовка

Путем разложения ацетилена выращены пленки графена на подслое железа, осажденном на окисленный кремний. При последующем удалении железа в водном растворе нитрата железа получены структуры, магнитосопротивление которых достигает значения 100% в поле 0.5 Т при 293 К и имеет

квазилинейную зависимость MR(B) в полях 0.1 - 0.8 Т, что особенно привлекательно для создания магниторезистивных сенсоров.

Изменение структуры монокристаллов 1,1-диамино-2,2-динитроэтилена (FOX-7) в процессе термических превращений в условиях непрерывного вакуумирования

Волкова Н.Н., Шилов Г.В., Данильчик А.В., Шастин А.В.
ИПХФ РАН, г. Черноголовка

С помощью рентгеноструктурного анализа исследовано изменение структуры монокристаллов FOX-7 в ходе их термических превращений при 80 - 108°C в условиях непрерывного вакуумирования. Сублимация молекул FOX-7 с поверхности кристалла вначале приводит к совершенствованию структуры, а затем - к механическому разрушению монокристалла с сохранением параметров и пространственной группы элементарной ячейки.

Протективные свойства азотнокислого лантана по отношению к патогенам, с различными морфофункциональными свойствами

Веденкин А.С.¹, Втюрина Д.Н.¹, Григорьева Е.А.², Литвин А.А.¹, Михалева М.Г.¹, Николаева Т.Н.², Пронин Т.Н.², Стовбун С.В.¹

1. Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва
2. ФГБУ «ФНИЦЭМ им. Н.Ф. Гамалеи», Москва

На модели инфекции, вызванной вирулентным штаммом *Shigella flexneri* 2a, при введении мышам бактерий *Klebsiella pneumoniae*, *Staphylococcus aureus* и инфекции, вызванной вирусом простого герпеса 1 типа, проведена серия экспериментов по изучению протективного эффекта раствора и геля, содержащего азотнокислый лантан.

Роль *Entamoeba gingivalis* и *Trichomonas tenax* в микрофлоре ротовой полости человека

Втюрина Д.Н.¹, Гомберг М.А.², Трегубова М.А.¹, Стовбун С.В.¹

1. Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва
2. Московский научно-практический центр дерматовенерологии и косметологии, Москва

В работе оценивались возрастные корреляции обнаружения *T. tenax* и *E. gingivalis* в полости рта человека. Установлено, что статистически значимые результаты по выявлению *T. tenax* и *E. gingivalis* начинаются с 30 лет. Существенной разницы между мужчинами и женщинами по всей выборке не обнаружено.

Бисдиамидофосфиты в палладиевом и родиевом энантиоселективном катализе

Гаврилов В.К.¹, Жеглов С.В.¹, Ширяев А.А.¹, Бирин К.П.², Михель И.С.²

1. РГУ имени С.А. Есенина, г. Рязань

2. ИФХЭ имени А.Н. Фрумкина РАН, г. Москва

Прямым фосфорилированием гидроксилсодержащих амидов щавелевой кислоты и 1,8-октандиола получена группа неизвестных ранее бисдиамидофосфитных лигандов. Новые индукторы хиральности протестированы в реакциях Pd-катализируемого аллильного замещения и Rh-катализируемого гидрирования α,β -ненасыщенных карбоновых кислот.

Супрамолекулярные системы на основе ПАВ и макроциклов для повышения растворимости и биодоступности гидрофобных лекарственных веществ

Захаров В.М.¹, Гаврилова Е.Л.¹, Захарова Л.Я.^{1,2}, Синяшин О.Г.^{1,2}

¹ФГБОУ ВО «КНИТУ», Казань

²ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань

Разработаны системы на основе амфифильных и макроциклических (каликсарены различной природы) соединений, позволяющих направленно регулировать морфологию бинарных систем и, опосредованно, эффективность загрузки наноконтейнеров, важным свойством которых является эффективность и контролируемость процессов связывания и высвобождения лекарств. Установлены размеры частиц, поверхностный заряд, солюбилизационная емкость в отношении спектральных зондов, новых и коммерческих лекарственных веществ.

Сложные оксиды PЗЭ со структурой Pb_2SbO_6 - новые гетерогенные катализаторы в реакциях окисления СО

Егорышева А.В.¹, Берсенева А.А.¹, Либерман Е.Ю.², Медведева С.А.², Подъельникова Е.С.², Кирдянкин Д.И.¹, Гайтко О.М.¹, Эллерт О.Г.¹

1 ИОНХ РАН, Москва

2 РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва

Предложены новые гетерогенные катализаторы окисления СО на основе сложных оксидов PЗЭ со структурой $PbSb_2O_6$, обладающие не только высокой активностью, но и стабильностью в процессе эксплуатации. Разработана методика их синтеза, исследованы магнитные и каталитические свойства.

Влияние 1,6-гександитиола как стабилизирующего лиганда на мерцание флюоресценции коллоидных квантовых точек InP@ZnS

Гак В.Ю.¹, Спириин М.Г.¹, Бричкин С.Б.¹, Разумов В.Ф.^{1, 2}

1. ИПХФ РАН, Черноголовка
2. ФФФХИ МГУ, Москва

Синтезированы коллоидные квантовые точки (ККТ) InP@ZnS с использованием 1-додекантиола и 1,6-гександитиола. Измерены кинетические кривые затухания и рассчитаны распределения времён жизни их люминесценции, отражающие распределение ККТ в *on* и *off* состояниях. Определена оптимальная доля 1,6-гександитиола для подавления мерцания флюоресценции.

Влияние условий отжига на электрофизические свойства тонких пленок CZTSe, получаемых методом последовательного электрохимического осаждения

*Гапанович М.В.¹, Ракитин В.В.¹, Сазонов А.А.², Седловец Д.М.³,
Башкиров С.А.⁴, Новиков Г.Ф.^{1,2}*

1. ИПХФ РАН, г. Черноголовка
2. МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва
3. ИПТМ РАН, г. Черноголовка
4. ГНПО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», г. Минск

В данной работе исследовано влияние условий селенизации на фазовый состав и электрофизические свойства пленок $\text{Cu}_{1,5}\text{Zn}_{1,1}\text{Sn}_{0,9}\text{Se}_4$, полученных методом последовательного электрохимического осаждения. Исследование фазового состава синтезированных образцов методами РФА и рамановской спектроскопии показало, что при увеличении количества селена в реакторе существенным образом меняются параметры кристаллической решетки образцов, что обусловлено постепенным разрушением кестеритной фазы. При этом последовательные сопротивления возрастали от 3 до 10 МОм

Физико-химические свойства двухкомпонентных покрытий на основе наночастиц металлов

Гатин А.К., Гришин М.В., Сарвадий С.Ю., Шуб Б.Р.
ИХФ РАН, Москва

Методами сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии установлены морфология и электронное строение биметаллических покрытий на основе наночастиц золота и меди, золота и никеля, нанесенных на поверхность высокоориентированного пиролитического графита. Для указанных систем определены адсорбционные свойства по отношению к водороду и кислороду.

Исследование формирования смешанных Mn-Co оксидов из перовскитов состава $\text{LaCo}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$

*Герасимов Е.Ю.^{1,2}, Михненко М.Д.^{1,2}, Булавченко О.А.^{1,2}, Исупова Л.А.¹,
Цыбуля С.В.^{1,2}*

1. ИК СО РАН, Новосибирск
2. НГУ, Новосибирск

Методами высокотемпературного рентгенофазового анализа и просвечивающей электронной микроскопии проведено исследование формирования смешанных Mn-Co оксидов в условиях нагрева в атмосфере водорода при различных температурах. Показано образование гетерогенных систем Mn-Co-O/ $\text{LaCo}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ и Mn-Co-O/ La_2O_3 при различных температурах.

Влияние динитрозильных комплексов железа (доноров NO) на метаболизм кардиомиоцитов

*Гизатуллин А.Р.¹, Акентьева Н.П.¹, Санина Н.А.^{1,2}, Горячев Н.С.^{1,2},
Шкондина Н.И.¹, Приходченко Т.Р.¹*

1. ИПХФ РАН, Черноголовка.
2. МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва.

В работе представлены результаты биохимических эффектов динитрозильных комплексов железа (ДНКЖ) в кардиомиоцитах. Результаты экспериментов продемонстрировали, что данные соединения влияют на метаболизм кардиомиоцитов и при дальнейшем исследовании могут стать перспективными лекарственными препаратами.

Физико-химические, молекулярные и детонационные свойства 5,5'-бис(1H-тетразолил)амин и некоторых его производных

Голубев В.К.^{1,2}, Кланётке Т.М.²

1. Независимый эксперт, Нижний Новгород
2. Университет Людвиг-Максимилиана (ЛМУ), Мюнхен

Приведены результаты изучения свойств таких веществ, как 5,5'-бис(1H-тетразолил)амин, 5,5'-бис(1H-тетразолил)амин моногидрат, 5,5'-бис(2-метилтетразолил)амин и 5,5'-бис(2-метилтетразолил)метиламин. Наряду с экспериментальными методами исследования, использовались расчетные квантовохимические, термодинамические и газодинамические методы.

Температура электронов в атмосферном слое 80-110 км

*Голубков Г.В.^{1,2}, Бычков В.Л.³, Малышев Н.С.¹,
Бессараб Ф.С.⁴, Голубков М.Г.¹*

1. Институт химической физики им. Н.Н.Семенова РАН, Москва
2. НИЦ «Курчатовский институт», Москва
3. Физический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва
4. КФ ИЗМИРАН, Калининград

Рассчитано распределение температуры электронов по высоте в атмосферном слое 80-110 км над поверхностью Земли в нормальных геофизических условиях. Модель включает в себя 26 компонент плазмы (нейтральные атомы и молекулы, положительные и отрицательные ионы, электроны и возбужденные частицы) и более 180 плазмохимических реакций с их участием. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №16-05-00052).

Процесс *l*-перемешивания ридберговских молекул азота в собственном газе

*Голубков Г.В.^{1,2}, Куверова В.В.³, Малышев Н.С.¹, Адамсон С.О.¹,
Бессараб Ф.С.⁴, Юрова И.Ю.⁵, Голубков М.Г.¹*

1. Институт химической физики им. Н.Н.Семенова РАН, Москва
2. НИЦ «Курчатовский институт», Москва
3. Центр химической физики атмосферы, Москва
4. КФ ИЗМИРАН, Калининград
5. Физический факультет СПбГУ, Санкт-Петербург

Рассчитано сечение процесса *l*-перемешивания при медленном столкновении ридберговской молекулы азота N_2^{**} с нейтральной молекулой N_2 в основном состоянии. Показано, что для главных квантовых чисел $n = 43-45$ вследствие сильной неадиабатической связи с вращением сечение процесса имеет ярко выраженный интерференционный минимум. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №16-05-00052).

Динамика аморфных ферромагнитных микропроводов на основе Со в слабых магнитных полях

Гребенщиков Ю.Б.^{1,2}, Гудошников С.А.^{1,3}, Любимов Б.Я.¹, Меньшов С.А.¹

¹) ИЗМИРАН, Троицк, Москва

²) Финансовый университет при правительстве России, Москва

³) НИТУ «МИСиС», Москва

Исследуется недиагональный ГМИ эффект в аморфном микропроводе на основе Со. Рассчитаны и измерены зависимости Фурье-компонент отклика

намагниченности микропровода на переменный ток в нем от величины продольного магнитного поля H_z . Найдены условия наибольшей чувствительности указанных компонент Фурье к величине поля H_z

Адсорбционные свойства наноструктурированной золото-медной пленки на графите

Гришин М.В., Гатин А.К., Сарвадий С.Ю., Шуб Б.Р.
ИХФ им. Н.Н. Семенова РАН, Москва

Определены адсорбционные свойства пленок из наночастиц золота и меди на графите по отношению к водороду, окиси углерода и кислороду. Окись углерода и водород восстанавливают оксид меди, но последний также адсорбируется на свободных от оксида частицах золота и меди. Экспозиция в кислороде приводит к повторному окислению меди.

Морфология и электронное строение покрытия, образованного наночастицами золота и меди, на графите

Гришин М.В., Гатин А.К., Сарвадий С.Ю., Шуб Б.Р.
ИХФ им. Н.Н. Семенова РАН, Москва

Методами сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии исследовано золото-медное наноструктурированное покрытие на графите. Установлено, что покрытие состоит из сферических наночастиц золота и меди диаметром 2-4 нм, причем золотые частицы не содержат примесей, а медные частицы могут быть покрыты слоем оксида.

Физико-химические свойства покрытия на основе Ni и Pd наночастиц

*Гришин М.В.¹, Сарвадий С.Ю.¹, Шуб Б.Р.¹, Ростовщикова Т.Н.²,
Маслаков К.И.², Гуревич С.А.³, Кожевин В.М.³, Явсин Д.А.³*

1. ИХФ им. Н.Н.Семенова РАН, Москва
2. МГУ им. Ломоносова, Москва
3. ФТИ им. А.Ф.Иоффе, Санкт-Петербург

Определены физико-химические характеристики биметаллических покрытий на основе наночастиц никеля и палладия на графите: размер и электронное строение единичных наночастиц, их адсорбционные свойства по отношению к молекулярному водороду и окиси углерода.

Морфология золотых и никелевых наноструктурированных покрытий, созданных различными методами на поверхности графита

Гатин А.К.¹, Гришин М.В.¹, Дохликова Н.В.¹, Кулак А.И.², Сарвадий С.Ю.¹, Харитонов В.А.¹, Шарова М.В.¹, Шуб Б.Р.¹

1. ИХФ им. Н.Н.Семенова РАН, Москва
2. ИОНХ НАН Беларуси, Минск

Определены морфологические особенности покрытий, состоящих из наночастиц золота и никеля, нанесенных на поверхность высокоупорядоченного пиролитического графита (ВОПГ) методами пропитки поверхности и лазерного электродиспергирования.

Определение природы радикальных интермедиатов с использованием квантово-химического расчета спектральных параметров

Громов О.И.¹, Кокорин А.И.², Голубева Е.Н.¹

1. МГУ имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва
2. Институт химической физики имени Н.Н. Семенова РАН, Москва

В представленной работе протестирован ряд широко используемых функционалов плотности и подходов в рамках теории функционала плотности для расчета магнитных параметров нитроксильных радикалов и бирадикалов.

Многоцелевая оптимизация условий проведения одно и много циклического производства для реакции диметолкарбоната со спиртами на основе кинетической модели

Губайдуллин И.М.^{1,2}, Коледина К.Ф.^{1,2}, Коледин С.Н.^{1,2}

1. Уфимский государственный нефтяной технический университет, г.Уфа
2. ИНК УФИЦ РАН, г. Уфа

На основе разработанной кинетической модели решена задача многоцелевой оптимизации условий проведения одноциклового реакции диметолкарбоната со спиртами в присутствии металлокомплексных катализаторов для двух наборов попарно независимых целевых функций: выход целевого продукта и рентабельность; производительность и рентабельность.

Селективная деоксигенация продуктов на основе биомассы в реакции каталитического крекинга

Дементьев К.И., Паланков Т.А., Хаджиев С.Н.

Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва

Показана возможность селективной деоксигенации жидкого продукта пиролиза биомассы в реакции каталитического крекинга на цеолитсодержащих

катализаторах в присутствии углеводородов. При этом кислород утилизируется в виде воды; селективность превращения продукта пиролиза биомассы в жидкие углеводороды составляет свыше 70%.

Каталитические свойства Fe-содержащих суспензий для осуществления синтеза Фишера-Тропша в сларри-реакторе, промотированные щелочными металлами

Дементьева О.С., Чудакова М.В., Куликова М.В.
ИНХС РАН, Москва

Проведено исследование железосодержащих систем для осуществления синтеза углеводородов из CO и H₂ по методу Фишера-Тропша и изучена возможность увеличения селективности катализаторов в отношении целевых продуктов синтеза путем введения в качестве промотирующей добавки калия и натрия. Установлено влияние концентрации промотирующей добавки щелочного металла на активность каталитических систем и селективность образования различных фракций углеводородов.

Превращение этанола в линейные альфа-спирты в присутствии медьсодержащих катализаторов

Жарова П.А.¹, Чистяков А.В.¹, Тихонова О.Г.², Цодиков М.В.¹
1. ИНХС РАН, Москва
2. ИОНХ РАН, Москва

Обнаружено, что в присутствии Cu/Al₂O₃ сверхкритический этанол эффективно превращается в α-спирты. Изучено влияние зарядового состояния Cu, концентрации воды в исходном спирте, кинетические закономерности реакции. С помощью структурных методов анализа изучен генезис катализаторов.

Гетерогенно-каталитическая кросс-конденсация биоспиртов

Варданян Г.А., Жарова П.А., Чистяков А.В., Цодиков М.В.
Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва

Продемонстрирована перспективность использования Re-W/Al₂O₃ и Re-Ta/Al₂O₃ катализаторов для проведения реакций кросс-конденсации биоксигенатов с целью получения либо алифатических углеводородов, либо высших спиртов и кетонов. Обнаружено, что каталитическая активность коррелирует с концентрацией Re(+7) в катализаторе.

Кросс-конденсация биооксигенатов в присутствии Pt-Re/Al₂O₃ катализатора

Стодолина Е.П., Жарова П.А., Чистяков А.В., Цодиков М.В.
Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва

Обнаружено, что предварительно восстановленный промышленный платинорениевый катализатор ПР-71 проявляет высокую активность в превращении этанола во фракцию олефинов C₄-C₁₂ и в кросс-конденсации этанола с глицерином, ацетоном и пропанолом нормального и изо строения.

Кросс-конденсация биооксигенатов в присутствии Pt-Sn/Al₂O₃ катализатора

Левин И.С., Жарова П.А., Чистяков А.В., Цодиков М.В.
Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва

Изучены закономерности реакции кросс-конденсации биооксигенатов в присутствии оригинальных катализаторов на основе биметаллических органических комплексов ((PPh₄)₃[Pt(SnCl₃)₅]. Изучены структурные особенности моно- и биметаллических катализаторов и выявлены корреляции между их строением и активностью.

Молекулярные проводники BEDT-TTF с анионами на основе галогенидов висмута

*Жилыева Е.И.¹, Шилов Г.В.¹, Торунова С.А.¹, Флакина А.М.¹, Ван В.К.²,
Любовская Р.Н.¹*

1. Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка
2. Институт экспериментальной минералогии РАН, Черноголовка

Синтезированы и исследованы катион-радикальные соли с анионами на основе галогенидов висмута, (BEDT-TTF)₄Bi₂Cl₉, (BEDT-TTF)₄(BiCl₅)_{1.7} и (BEDT-TTF)₄Bi₂I₈·PhCl. Соединения - полупроводники с E_g ~ 0,03эВ. Работа выполнена при поддержке РФФИ (16-03-01103) и Государственного задания, № гос. регистрации 0089-2014-0036.

Иодокадмиаты бис(этилендитио)тетратиафульвалена

Жилыева Е.И., Флакина А.М., Шилов Г.В., Любовская Р.Н.
Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

Синтезированы новые слоистые органические проводники на основе BEDT-TTF и иодида кадмия. Получены монокристаллы (BEDT-TTF)₄CdI₄(C₆H₄Cl₂), (BEDT-TTF)₄CdI₄(C₆H₅Cl) и (BEDT-TTF)₄Cd_{1.38}I₃, изучена структура и

проводящие свойства. Работа выполнена по теме Государственного задания, № гос. регистрации 0089-2014-0036.

Влияние концентрации наполнителя на ИК-спектры и топографию поверхности пленок ППК-PbS

*Иванова О.П.¹, Криничная Е.П.¹, Морозов П.В.², Завьялов С.А.³,
Журавлева Т.С.¹*

¹ ИБХФ РАН, Москва

² МПГУ, Москва

³ НИЦ “Курчатовский институт”, Москва

Исследованы ИК-спектры и морфологические особенности (метод АСМ) пленок полимерных нанокомпозитов ППК-PbS толщиной $d \sim 0.5$ мкм в зависимости от концентрации наполнителя. Выявлены изменения в ИК-спектрах и АСМ-изображениях, которые коррелируют между собой.

ИК-спектры тонких пленок полимерных нанокомпозитов на основе ППК и сульфидов, полученных методом VDP

*Иванова О.П.¹, Криничная Е.П.¹, Морозов П.В.², Пирязев А.А.³,
Завьялов С.А.⁴, Журавлева Т.С.¹*

¹ ИБХФ РАН, Москва

² МПГУ, Москва

³ МГУ им. М.В. Ломоносова, ФФФХИ, Москва

⁴ НИЦ “Курчатовский институт”, Москва

Проведены исследования ИК-спектров пленок полимерных нанокомпозитов ППК-CdS, ППК-PbS, ППК-S толщиной $d \sim 0.5$ мкм. в зависимости от содержания наполнителя. Выявлены общие изменения в ИК-спектрах, характерные для исследуемых сульфидных соединений. Обнаружены индивидуальные особенности для каждого наполнителя.

Мезопористые наноматериалы на основе твердых растворов диоксида церия: получение и свойства

Загайнов И.В.

ИМЕТ РАН, Москва

Проведенные исследования показали целесообразность использования в процессе окисления СО катализаторов, в которых использовали твердые растворы $(\text{Cu}_x\text{Mn}_{1-x})_{0.1}\text{Ce}_{0.9}\text{O}_2$ и $(\text{Cu}_x\text{Mn}_{1-x})_{0.1}\text{Zr}_{0.1}\text{Ce}_{0.8}\text{O}_2$ с размерами частиц до 10-15 нм и удельной поверхностью до 100 м²/г, при этом система $\text{Cu}_{0.08}\text{Mn}_{0.02}(\text{Zr}_{0.1})\text{Ce}_{0.9}\text{O}_2$, полученные простым методом соосаждением с одновременной УЗ обработкой, показали наилучшую каталитическую активность.

Влияние колебаний, шероховатости и деформированности поверхности на ее поверхностную энергию при адсорбции

Титов С.В.¹, Зайцева Е.С.², Воронцов П.С.², Товбин Ю.К.^{2,3}

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва

²ГНЦ «НИФХИ им. Л.Я. Карпова», Москва

³ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

Разработаны атомистические модели адсорбции с учетом эффектов колебаний атомов адсорбента и адсорбата на плоской открытой поверхности, шероховатости и разной степени деформированности поверхности адсорбента, влияющие на изотермы и другие равновесные характеристики границы раздела твердое – мобильная фаза (пар и/или жидкость).

Изучение термического разложения 2,4-бис(диметиламино)-6-тринитрометил-1,3,5-триамина методами ДСК и масс-спектрометрии

Захаров В.В., Шастин А.В., Чуканов Н.В.

ИПХФ РАН, г. Черноголовка

Методами ДСК и масс-спектрометрии в диапазоне температур 300–650 К с использованием синхронного термического анализатора NETZSCH STA 409C Luxx изучено термическое разложение энергоемкого соединения 2,4-бис(диметиламино)-6-тринитрометил-1,3,5-триамина. Определены: тепловой эффект разложения в изученном температурном диапазоне и активационные параметры этого процесса.

Топологические и оптические свойства пленок сульфида кадмия, легированного ионами Ag^+ , Cu^{+2}

Звягина О.В., Семенов В.Н., Самофалова Т.В., Нитута А.Н., Проскурина Е.Ю.

Воронежский государственный университет, г. Воронеж

В данной работе представлены результаты исследования свойств пленок сульфида кадмия, легированных ионами серебра и меди в концентрации 10^{-6} ат. %. При введении примеси ионов меди поверхность пленок CdS приобретает менее развитый рельеф, а добавление ионов серебра влечет увеличение степени развития морфологии поверхности.

Хиральные индукторы фосфитной природы на основе гидроксилсодержащих амидов

Зимарев В.С., Максимова М.Г., Трунина В.М., Захаров С.И.

РГУ имени С.А. Есенина, г. Рязань

Прямым фосфорилированием гидроксилсодержащих амидов квадратной кислоты получены неизвестные ранее диамидофосфитные лиганды,

располагающие асимметрическими атомами фосфора. Новые индукторы хиральности протестированы в Pd-катализируемом аллильном замещении с достижением от 67% до 95% *ee*.

Роль катализатора в синтезе ацетиленовых спиртов на основе карбида кальция

Зиядуллаев О.Э.¹, Отамухамедова Г.К.², Саматов С.Б.¹

¹Чирчикский государственный педагогический институт, Узбекистан

²Национальный университет Узбекистана, Ташкент, Узбекистан

На основе циклических кетонов карбида кальция синтезированы новые ацетиленовые спирты в присутствии каталитической системы Cs₂CO₃/DMSO/2H₂O. Исследовано влияния различных факторов на выход продуктов. Определено влияние строения молекул кетонов, прямых и разветвленных и объемных радикалов вокруг >C=O группы на процесс синтеза ароматических ацетиленовых спиртов и выхода продуктов.

СТМ-исследование наночастиц меди на графите

Зубкова Е.И.¹, Кирсанкин А.А.²

1. ИХФ им. Н.Н.Семёнова, Москва

2. ИХФ им. Н.Н.Семёнова, Москва

Методами сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии изучены морфология и электронная структура наночастиц меди, синтезированных на поверхности высокоориентированного пиролитического графита методом пропитки раствором прекурсора. Была получена информация о средних размерах частиц и об их химическом составе.

Поверхностно-усиленная спектроскопия комбинационного рассеяния в исследовании сывороточного альбумина человека при сепсисе

Зюбин А.Ю.¹, Самусев И.Г.¹, Александров К.Ю.¹, Матвеева К.И.¹,

Слежкин В.А.², Брюханов В.В.¹

1. ФГАОУ ВО «БФУ им. И. Канта», Калининград.

2. ФГБОУ ВО «КГТУ», Калининград

В настоящей работе, с применением спектроскопии комбинационного рассеяния и тонких пленок серебра, синтезированных электрохимическим методом, исследована вторичная структура белковых молекул при патологии (сепсис) на структурированной серебряной поверхности. Выполнена идентификация конформационных изменений вторичной структуры.

Термохимические и энергетические характеристики N-(2,2-бис(метокси-NNO-азокси)этил)нитраминов

Зюзин И.Н., Лемперт Д.Б.
ИПХФ РАН, Черноголовка

Для четырех N-(2,2-бис(метокси-NNO-азокси)этил)нитраминов вычислены стандартные энтальпии образования. Термодинамическими расчетами показано, что эти соединения перспективны в качестве компонентов-охлаждителей для смесевых твердых ракетных топлив с пониженными температурами сгорания

Новые железосодержащие композитные катализаторы синтеза Фишера-Тропша на основе целлюлозы

Иванцов М.И., Сергеев Д.И., Куликова М.В.
ИНХС РАН, Москва

В работе показана возможность формирования железосодержащих катализаторов синтеза углеводородов и оксигенатов с различными свойствами. Варьирование температуры термической деструкции прекурсоров приводит к изменению селективности контактов в отношении образования оксигенатов или углеводородов различного группового и фракционного состава.

Особенности синтеза сиалона с использованием золь-гель метода

Ивичева С.Н., Овсянников Н.А., Лысенков А.С., Каргин Ю.Ф.
ИМЕТ РАН, Москва

Исследованы структурные и морфологические особенности сиалонов, полученных при использовании разных прекурсоров (нитрида кремния, нитрида алюминия и смеси нитридов кремния и алюминия) с нанесением соответствующего оксида кремния или алюминия, золь-гель методом при одинаковых условиях обжига (время, температура, давление). Показано влияние состава материала предшественника на фазовый состав конечного продукта и морфологические особенности порошков, полученных в одну стадию обжига в атмосфере азота.

Получение трехмерных нанокомпозитов на основе опаловых матриц и аэрогелей при обработке ксерогелей спиртами в сверхкритических условиях

Ивичева С.Н., Каргин Ю.Ф.
ИМЕТ РАН, Москва

Заполнение структурных пустот опаловых матриц (ОМ) кремнезолями с различными легирующими добавками лежит в основе синтеза синтетического благородного опала, лазерно-активных сред, оптически прозрачных и люминесцентных материалов. Разработаны способы синтеза аэрогелей на основе SiO₂ легированных РЗЭ в пустотах 3-D опалоподобных структур (опаловых матриц) в СК условиях изопропанола с целью объемного заполнения пустот плотнейшей шаровой упаковки ОМ. Показаны условия СК сушки легированных РЗЭ гелей при обработке 3D упорядоченных нанокомпозитов на основе ОМ.

Взаимосвязь электрического сопротивления изоляции из поливинилхлорида и биомассой микроскопического гриба *Aspergillus niger*

*Калинина И.Г.¹, Гумаргалиева К.З.¹, Семенов С.А.², Казарин В.В.¹,
Жданова О.А.¹*

¹ИХФ РАН, г. Москва.

²ИФХЭ РАН, г. Москва

Предложено уравнение, связывающее изменение электрического сопротивления изоляции пластифицированного поливинилхлорида в условиях роста на нем микроскопического гриба *Aspergillus niger* с интенсивностью роста биомассы гриба на материале. Уравнение может быть использовано для прогнозирования микробиологической повреждаемости изоляции электропроводов в условиях их эксплуатации. Авторы выражают благодарность ФАНО России (Государственное задание 0082-2014-0009, АААА-А17-117040610309-0) за финансовую поддержку работы.

Влияние ДМСО на физико-химические свойства аммонийной формы Нафиона

*Каюмов Р.Р.¹, Радаева А.П.^{1,2}, Шмыглева Л.В.¹, Сангинов Е.А.¹,
Добровольский Ю.А.¹*

¹ИПХФ РАН, Черноголовка

²МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва

Работа направлена на изучение влияния пластификатора (ДМСО) на электротранспортные свойства и эксплуатационные характеристики полимерного аммоний замещенного электролита на основе перфторированной мембраны типа Нафион для применения электрохимических источниках тока.

Новые жёсткоэластичные материалы на основе полукристаллических полимеров

Аржакова О.В., Долгова А.А., Кечекьян П.А., Волынский А.Л.
МГУ имени М.В.Ломоносова, Химический факультет, Москва

Изучено влияние степени предварительной ориентации в физически активной жидкой среде на механические свойства и структуру пленок полиэтилена высокой плотности (ПЭВП) при деформировании на воздухе. Показано, что предварительно ориентированные в ФАЖС образцы ПЭВП являются аналогами жёсткоэластичных полимеров.

Получение газоразделительных мембран на основе ПЭТФ, деформированного по механизму крейзинга

Кечекьян П.А., Аржакова О.В., Рухля Е.Г., Долгова А.А., Волынский А.Л.
МГУ имени М.В.Ломоносова, Химический факультет, Москва

Исследованы зависимости коэффициентов проницаемости и селективности различных газов для аморфного стеклообразного ПЭТФ, деформированного в *n*-пропанол по механизму классического крейзинга. Показана возможность создания газоразделительных мембран со сплошным газоразделительным слоем на основе ПЭТФ.

Диаграмма кривых перемагничивания первого порядка молекулярного магнетика $K_{0.4}[Cr(CN)_6][Mn(R/S)-pn](R/S)-pnH_{0.6}$

Кирман М.В., Моргунов Р.Б.
Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

В результате анализа диаграммы кривых перемагничивания первого порядка молекулярного магнетика $K_{0.4}[Cr(CN)_6][Mn(R/S)-pn](R/S)-pnH_{0.6}$ были разделены вклады доменной ферримагнитной структуры и нелинейных спиновых ансамблей, различающихся полями взаимодействия.

Электронное строение кластеров $Cu_{13}H_m$, $m=1-12$

Курсанкин А.А., Дохликова Н.В.
ИХФ РАН, Москва

С помощью численного эксперимента в рамках теории DFT проведено исследование изменений атомной и электронной структуры кластеров меди при взаимодействии с атомарным водородом и сопоставление с результатами аналогичных расчетов для кластеров золота, что указывает на возможное сходство адсорбционных свойств наночастиц золота и меди в некоторых типах реакций.

Микропористые полифенилены

Ковалев А.И., Мартыянова Е.С., Сычева М.Н., Хотина И.А.
ИНЭОС РАН, Москва

Синтезированы микропористые полифенилены как с чисто фениленовой структурой, так и содержащие флуореновые, аценафтенковые и толановые фрагменты. Полимераналогичными превращениями были получены также пиридин- и имидазолсодержащие полифенилены. О пористости полимеров судили по данным удельной поверхности по БЭТ.

Квантово-химическое моделирование строения и свойств азопроизводных метилфлороглуцина

Ковальчукова О.В.^{1,2}, Рябов М.А.¹, Баженова А.И.², Гусаров Д.С.²

1. Российский университет дружбы народов, г. Москва
2. Российский государственный университет им. А.Н. Косыгина (технологии, дизайн, искусство), г. Москва

Квантово-химическим методом DFT выполнено моделирование молекулярного строения ряда азопроизводных метилфлороглуцина (МФГ): соединений HL¹, HL² и HL³.

Комплексные соединения титана(IV) как прекурсоры для синтеза наноразмерных катализаторов фотодеградации полифенолов

Яхья Абсалан, Ковальчукова О.В., Русул Алабада
Российский университет дружбы народов, г. Москва

Установлено, что комплексные соединения титана(IV) с гидроксилсодержащими органическими лигандами разлагаются с образованием наноразмерных частиц диоксида титана, которые проявляют фотокаталитическую активность в реакциях разложения фенолсодержащих соединений.

Применение гибридной мембранно-каталитической технологии в процессе получения ценных мономеров

*Константинов Г.И.¹, Федотов А.С.¹, Бухтеко О.В.¹, Уваров В.И.²,
Цодиков М.В.¹*

¹ИНХС РАН, Москва

²ИСМАН, РАН, г. Черноголовка

Разработана двухстадийная схема получения ценных мономеров в процессах дегидратации н-бутанола и изоамилового спирта с последующим дегидрированием. Катализатор K, Ce, Cr (5%) + Fe (5%)/ γ -Al₂O₃ позволяет

достигнуть выходы диеновых углеводородов сопоставимый промышленным. Использование ГМКР с селективным отводом водорода позволило увеличить производительность по 1,3-бутадиену с 1,6 до 2,26 л/(ч·г_{акт.компл.}) со степенью извлечения ультрачистого водорода ~16% при отсутствии разбавления водой сырьевой бутиленовой фракции. Данная работы была выполнена в ИНХС РАН и поддержана Грантом РФФ № 17-13-01270.

Расчет индукционного периода теплового взрыва энергетических материалов по данным ДСК высокого давления

Милёхин Ю.М., Коптелов А.А., Коптелов И.А., Rogozina А.А.
ФГУП “ФЦДТ “Союз”, г. Дзержинский

Приведены результаты расчета индукционных периодов теплового взрыва образцов смесевой энергетической композиции, содержащей нитроэффиры, при различных значениях температуры. Необходимые для расчета кинетические параметры найдены методом ДСК при давлениях до 10 МПа. Результаты расчета сопоставлены с данными литературных источников.

Еновый синтез 4-фенил-1,2,4-триазолин-3,5-диона с β-пиненом и 2-кареном: влияние температуры, высокого давления и растворителей

Корнилов Д.А., Аникин О.В., Шулятьев А.А., Колесникова А.О., Киселев В.Д.
Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань

Нами получены данные о влиянии температуры, растворителей и высокого гидростатического давления на скорость реакций енового синтеза 4-фенил-1,2,4-триазолин-3,5-диона с β-пиненом и 2-кареном. Определены тепловые эффекты данных реакций, рассчитаны величины объемов активации и объемов реакции.

Температурные коэффициенты объемных изменений изополярных реакций первого и второго порядка в жидкой фазе

Корнилов Д.А., Киселев В.Д., Мухаметзянов Т.А.
Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань

Нами получены уравнения для расчета величин объема активации и объема реакции изополярных реакций первого и второго порядка в интервале температур 200-400 К, зная величину объемного изменения при $T=298.15$ К.

Резистентность бактерий *Escherichia coli* к ансамицинам в присутствии изотопов магния

Корнилова Т.А., Летута У.Г.
ОГУ, Оренбург

Обнаружен синергетический эффект для антибиотиков группы ансамицинов и магнитного изотопа магния ^{25}Mg . Рост бактерий при этих концентрациях значительно замедляется, если в питательной среде содержится ион магния, имеющий ядерный спин. Обнаруженные эффекты связаны с механизмом действия ансамицинов.

Двумерные разбиения Пуассона-Вороного на квадратных решетках и их континуальные аналоги

Коробов А.И.

Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина

Обсуждается соотношение между дискретными разбиениями и их континуальными аналогами. Материал концентрируется в основном на особенностях дискретных разбиений с точки зрения целесообразности и полезности в науке о поверхности (и, возможно, в других областях) в зависимости от имеющихся экспериментальных данных.

Отравление в решеточной модели обратимого изменения формы островка нанесенного катализатора в условиях химической реакции

Коробов А.И.

Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина

Предложена и изучена кинетическим методом Монте Карло предельно упрощенная модель, в которой каталитически активны только однократно координированные атомы металла, возникающие при разворачивании изначально компактного неактивного островка. Неожиданный результат – внезапное непредсказуемое отравление стационарно функционирующей каталитической системы.

Активация когерентного акустического фона быстрого переносом электрона в реакции редокс-тушения экситона CdSe метилвиологеном

*Костров А.Н.¹, Гостев Ф.Е.¹, Шелаев И.В.¹, Айбуш А.В.¹, Титов А.А.¹,
Кочев С.Ю.², Кабачий Ю.А.², Надточенко В.А.¹*

1. ИХФ РАН г. Москва

2. ИНЭОС РАН, г. Москва

Быстрое тушение экситона акцептором электрона метилвиологеном (MV^{2+}) на поверхности квантовой точки CdSe импульсно инициирует акустические

колебания по механизму обратного пьезоэлектрического эффекта, что является причиной увеличения амплитуды когерентного акустического фона в системе $CdSe/MV^{2+}$ по сравнению с чистым $CdSe$.

Особенности электрофизических характеристик сегнетоэлектрического сополимера винилиденфторида, допированного молекулами Родамин 6Ж

*Кочервинский В.В.¹, Козлова Н.В.¹, Шмакова Н.А.^{1,2}, Градова М.А.³,
Градов О.В.⁴, Журавлева Т.С.⁵, Иванова О.П.⁵*

¹Филиал АО»НИФХИ им.Л.Я. Карпова, Москва

²ИСПМ РАН, Москва,

³ИХФ РАН, Москва

⁴ИНЭП РАН, Москва

⁵ИБХФ РАН, Москва

Сегнетоэлектрический сополимер винилиденфторида и тетрафторэтилена допировался молекулами красителя Родамин 6Ж РД6Ж. На временных зависимостях плотности тока наблюдается его переключение, где должно учитываться формирование пространственного заряда. Вводимый РД6Ж увеличивает долю цепей в конформации плоского зигзага. Обсуждается роль структуры сополимера в спектрах люминесценции.

Исследование структуры электрореологических жидкостей, наполненных слоистыми алюмосиликатами

*Кузнецов Н.М.¹, Бакиров А.В.^{1,2}, Столярова Д.Ю.^{1,2}, Петерс Г.С.¹,
Соколов М.А.¹, Белоусов С.И.¹, Чвалун С.Н.^{1,2}*

¹НИЦ «Курчатовский институт», Москва

²ИСПМ им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва

Исследованы процессы ориентации частиц различных модифицированных монтмориллонитов в полидиметилсилоксане под действием электрического поля методом рассеяния рентгеновских лучей. В работе обсуждаются зависимость степени ориентации частиц от природы модификатора в структуре глины и величины электрического поля.

Точки компенсации в тонких пленках $GdFeCo$

Куницына Е.И.^{1,2}, Коплак О.В.^{1,2}, Моргунов Р.Б.^{1,2}

1. ИПХФ РАН, Черногловка

2. ТГТУ, Тамбов

Магнитные свойства однослойных и двухслойных структур $GdFeCo$ с перпендикулярной намагниченностью исследовались в температурном диапазоне 2 – 300 К. Обнаружено необычное изменение характера петель

гистерезиса сточкой компенсации около 100 К Компенсация намагниченностей подрешеток FeCo и Gd будет рассмотрена в работе.

Шести-координационные нитрозильные комплексы Fe(II)-порфиринов с проксимальным диметилсульфоксидным лигандом

Минасян А.С., Оганесян А.А., Куртикян Т.С.
ЦИСМ НТЦОФХ НАН РА, Ереван, Армения

Показано существование термически нестабильных 6-координированных нитрозильных комплексов Fe(II)-порфиринов общей формулы (DMSO)Fe(Por)(NO) (Por - мезо-тетра-фенил- и мезо-тетра-*p*-толил-порфирилато дианионы), в которых амбидентный сульфоксидный лиганд координирован с ионом железа через атом серы.

Исследование влияния фуллерена C₆₀ на ИК-спектр атактического полиметилметакрилата

Абдулов Х.Ш.¹, Рашидов Д.¹, Табаров С.Х.¹, Туйчиев Ш.¹, Лаврик Н.Л.²

¹ НИИ ТНУ, Душанбе, Таджикистан.

² ИХКиГ им. В.В.Воеводского СОРАН, Новосибирск, Россия.

Сравнение спектров чистого полиметилметакрилата ПММА и композита ПММА+C₆₀ с содержанием фуллерена C₆₀ 1, 3, 5 и 10 масс.% показало, что, во-первых, частоты полос поглощения ПММА не зависят от концентрации фуллерена, во-вторых, оптическая плотность полос поглощения ПММА чувствительна к концентрации фуллерена. Из анализа спектров композита ПММА+C₆₀ с разной концентрацией фуллерена следует, что коэффициент молярного поглощения полосы при 528 см⁻¹, которая является собственной полосой поглощения фуллерена C₆₀, изменяется с увеличением концентрации допированного фуллерена немонотонным образом.

Исследование влияния фуллерена C₆₀ на кристаллические свойства полиэтилена низкой плотности методом ИК спектроскопии

Абдулов Х.Ш.¹, Рашидов Д.¹, Табаров С.Х.¹, Туйчиев Ш.¹, Лаврик Н.Л.²

¹ НИИ ТНУ, Душанбе, Таджикистан.

² ИХКиГ им. В.В.Воеводского СОРАН, Новосибирск, Россия.

Для чистого полиэтилена низкой плотности ПЭНП низкой плотности и композита ПЭНП + фуллерен C₆₀ разность между частотами ИК полос в дублете в области частот 729 см⁻¹ и 719 см⁻¹ является одинаковой и от концентрации фуллерена не зависит. Это наблюдаемое постоянство величины расщепления свидетельствует о том, что частицы фуллеренов при концентрациях менее 10% не влияют на межмолекулярное взаимодействие цепей кристаллической фазы полимера.

Изучение взаимодействия 4-хлорметил-1,3-диоксолана с алифатическими спиртами методом ИК спектроскопии

Муллоев Н.У.¹, Юсупова Дж.¹, Лаврик Н.Л.²

¹ ТНУ, Душанбе, Таджикистан.

² ИХКГ СО РАН, Новосибирск, Россия.

Методом ИК спектроскопии было оценено, что энергии образования Н-комплексов 4-хлорметил-1,3-диоксолана с алифатическими спиртами по величине составляют ряд: амиловый спирт \approx бутанол \approx этанол $<$ метанол. Такой ряд объясняется различием в величинах индуктивных эффектов для этих спиртов.

Спектральные свойства органических красителей тиазинового ряда

*Леонова Л.Ю., Гревцева И.Г., Овчинников О.В., Смирнов М.С.,
Кондратенко Т.С., Пайда И.А.*

ФГБОУ ВО "Воронежский государственный университет", г. Воронеж

В работе рассмотрены ИК спектры тиазинового ряда метиленового голубого (MV^+) и тионина (TH^+) в исходном состоянии в виде гидратов и в водном растворе. Анализ ИК спектров показал формирование димерных форм красителей при повышении их концентрации в водном растворе, а также протонирование молекул MV^+ в щелочной среде.

Влияние магнитных взаимодействий на элементный состав бактериальных клеток

Летута У.Г., Шайлина Д.М.
ОГУ, Оренбург

Метаболизм основных элементов в бактериях *E. coli* зависит от напряжённости внешнего постоянного магнитного поля и изотопов цинка, содержащихся в питательной среде. Совместные эффекты внешнего постоянного магнитного поля и изотопа цинка ^{67}Zn и магния ^{25}Mg обнаружены в количестве в содержании Na, Ca и Mg в диапазоне 65-80 мТл. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-60021 мол_а_дк.

Фотодинамическая инактивация микроорганизмов экзогенными фотосенсибилизаторами

Летута С.Н., Алиджанов Э.К., Ишемгулов А.Т., Лантух Ю.Д., Пашкевич С.Н.
ФГБОУ ВО «Оренбургский государственный университет», г. Оренбург

Осуществлены фотоиндуцированные повреждения клеточных мембран микроорганизмов при облучении растворов в присутствии связанных и

несвязанных фотосенсибилизаторов (ФС). Обсуждаются возможные механизмы сенсibilизированного поражения клеток, основанные на (i) химическом повреждении их мембран синглетным кислородом, (ii) безызлучательном переносе энергии на молекулы мембран с высоких электронно-возбужденных состояний молекул ФС или (iii) локальной гипертермии.

Спектральные и фотохимические свойства 8-алкоксипроизводных 2-стирилхинолина

Ли В.М.¹, Дозморов С.А.², Гавришова Т.Н.¹, Будыка М.Ф.¹

¹ИПХФ РАН, Черноголовка

²ФФФХИ МГУ им. Ломоносова, Москва

Исследование фотохимических свойств бихромофорной диады, в которой фрагменты 2-стирилхинолина соединены посредством диоксидакаметиленового “мостика”, показало, что в диаде протекают две конкурентные реакции – фотоизомеризация и [2+2]фотоциклоприсоединение.

Спонтанные колебания намагниченности макроспина в синтетических антиферромагнетиках Pt/Co/Ir/Co/Pt с перпендикулярной анизотропией

Львова Г.Л., Куницына Е.И., Моргунов Р.Б.

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

Обнаружены спонтанные колебания макроскопической намагниченности в гетероструктуре Pt/Co/Ir/Co/Pt. Осцилляция макроспина может быть обусловлена высокой скоростью зарождения фазы обратной намагниченности, наведенной обменным и магнитным дипольным взаимодействием между зародышами фаз, возникающими в разных слоях.

Сверхкритические флюиды для получения полимерных частиц и покрытий

Макарян И.А., Костин А.Ю., Седов И.В.

ИПХФ РАН, Черноголовка

Рассматривается конкурентоспособная альтернатива традиционным технологиям нанесения полимерных покрытий, основанная на использовании сверхкритических флюидов. Предлагается оригинальная технология получения полимерных микрочастиц с использованием сверхкритических флюидов и многослойных композиционных покрытий на их основе.

**Свойства композиционных материалов на основе
сверхвысокомолекулярного полиэтилена и бора, полученных
полимеризацией *in situ***

*Маклакова И.А., Новокшинова Л.А., Кудинова О.И., Гринев В.Г.,
Крашенинников В.Г.
ИХФ РАН, Москва*

Синтезированы радиационнозащитные композиционные материалы на основе СВМПЭ и бора методом полимеризационного наполнения (полимеризацией *in situ*) с содержанием бора в пределах 22-88 масс.% (10-75 об.%) при обеспечении равномерного распределения частиц наполнителя в СВМПЭ матрице. Исследованы их механические свойства.

**О влиянии тонких отличий в свойствах низкомолекулярного
полилактида с концевыми карбоксильными группами на свойства
наночастиц из него с доксорубицином**

*Максименко О.О., Шипуло Е.В., Кумскова Н.А., Ермоленко Ю.В.,
Семенкин А.С., Осипова Н.С., Гельперина С.Э.
ООО «Технология лекарств», Химки, Московская область*

Исследовано влияние тонких различий в составе различных образцов PLGA на параметры наносомальной формы доксорубицина, полученной на основе этих полимеров. Показано, что небольшие отличия между полимерами (ММР, остаточный мономер, КЧ) приводят к существенному изменению свойств НЧ, в том числе в скорости их гидролиза и профилю высвобождения доксорубицина.

Адсорбция ионов на межфазной границе вода-гидрофобная матрица

*Маматкулов Ш.И., Хусанов З., Рузимурадов О.Н.
Туринский политехнический университет в городе Ташкенте*

Методами молекулярной динамики проведено исследование адсорбции ионов OH^- и H_3O^+ на межфазной границе вода-воздух. Рассчитаны поверхностные натяжения растворов NaOH , HCl и NaCl и достоверность полученных результатов подтверждена количественным и качественным согласием и экспериментальных результатов. Из исследованных ионов, только H_3O^+ адсорбируется к границе раздела воздух-вода. Адсорбция объясняется глубокой потенциальной ямой, вызванной ориентацией диполя H_2O + в межфазном электрическом поле, что было подтверждено результатами квантово-химических исследований.

Моделирование процесса адсорбции атомов тяжелых металлов на поверхности графена для биосенсорных приложений

Маматова А.А.¹, Садыкова О.Г.², Глебов А.А.²

1 Казанский Федеральный Университет, Казань

2 Объединенный Институт Ядерных Исследований

Использование графена в качестве датчиков следующего поколения для обнаружения в реальном времени токсичных тяжелых металлов требует четкого понимания поведения этих металлов на поверхности графена и реакции графена на воздействие адсорбата. Наши расчеты сфокусированы на исследовании взаимодействия 3 тяжелых металлов, а именно Cd, Hg и Pb, с графеновыми квантовыми точками - расчет энергии связи

Каталитические свойства $\text{BiO}_x/\text{TiO}_2$ фотоэлектродов с разной концентрацией Bi - ионов

Маслов Д.А.¹, Цодиков М.В.¹, Гринберг В.А.², Емец В.В.²

1. ИНХС РАН, Москва

2. ИФХЭ РАН, Москва

Изучена зависимость фотоэлектрокаталитического окисления муравьиной кислоты в водном растворе КОН (рН = 4) при освещении фотоанодов $\text{TiO}_2/\text{F}:\text{SnO}_2$ монохроматическим светом (464 нм, мощность освещения 10 мВтсм⁻²) от концентрации вводимых ионов Bi^{3+} .

Конфокальная микроскопия высыхающей капли жидкости, допированной наночастицами серебра варьируемого размера

Зюбин А.Ю.¹, Константинова Е.И.^{1,2}, Самусев И.Г.¹, Александров К.Ю.¹, Малащенко В.В.¹, Матвеева К.И.¹, Слежкин В.А.², Гончаров А.Г., Брюханов В.В.¹

1. ФГАОУ ВО «БФУ им. И. Канта», Калининград.

2. ФГБОУ ВО «КГТУ», Калининград

В работе приведены результаты спектральных исследований высыхающей водной капли с красителем РБЖ, допированной наночастицами серебра варьируемого размера. С помощью метода конфокальной микроскопии исследовано влияние плазмонных эффектов на интенсивность флуоресценции высыхающей капли и процессы термофореза.

СВС-металлургия титано-хромового борида из смесей на основе хромата кальция.

Милосердов П.А., Юхвид В.И., Горшков В.А., Милосердова О.М.
ИСМАН, г. Черноголовка

Данная работа направлена на разработку нового подхода к получению высокотвердой литой тугоплавкой керамики на основе боридов хрома и титана с использованием метода СВС-металлургии. Вместо нетехнологичного CrO_3 в качестве хромосодержащего агента выбран CaCrO_4 . Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-08-00804.

Динамические свойства эластомерных композитов, наполненных многостенными углеродными нанотрубками

Митряева Н.С.^{1,2}, Мышлявцев А.В.¹, Стрижак Е.А.^{1,3}

¹ФГБОУ ВПО «ОмГТУ», г. Омск

²АО «НТЦ Углеродных материалов», г. Омск

³ФГУП «ФНПЦ «Прогресс», г. Омск

Исследовано влияние многостенных углеродных нанотрубок на динамические при сдвиге (безроторный реометр DRPA 3000) и динамические при осциллирующей нагрузке (динамический механический анализатор DMA 242D) свойства резины. Определена возможность использования многостенных углеродных нанотрубок для создания эластомерных материалов с улучшенными свойствами.

Получение синтетического природоподобного волокна из целлюлозы методом прямого растворения в ионной жидкости

Михалева М.Г.¹, Усачев С.В.¹, Втюрина Д.Н.¹, Политенкова Г.Г.¹, Ковалева К.И.¹, Герасимов Д.С.², Никольский С.Н.¹, Мельников В.П.¹, Стовбун С.В.¹

1. Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва

2. ФКП «Алексинский химический комбинат», Алексин

В работе рассмотрены перспективные задачи материаловедения в области наукоемкого использования целлюлозы и нанотехнологий или нанохимии – получение и применение наноцеллюлозы и целлюлозного волокна путем растворения в ионных жидкостях. Цель работы – научиться управлять свойствами материалов на целлюлозной основе.

Горение в свободном газовом заряде после распада детонации

Михалкин В.Н.^{1,2}, Медведев С.П.¹, Хомик С.В.¹

¹ ИХФ РАН, Москва

² АГПС МЧС РФ, Москва

Экспериментально исследовано горение в свободном цилиндрическом газовом заряде, которое инициировалось перепуском из инициирующей трубы взрывным процессом. Получены зависимости изменение скорости горения вдоль свободного газового заряда. Для всех исследованных смесей наблюдается пульсирующий характер горения вдоль заряда. Фактически наблюдается затухающий колебательный процесс от скорости детонации на срезе инициирующей трубы до 50-30 м/с в конце газового заряда.

DFT / GIAO расчет ЯМР ¹H и ¹³C спектров 1,4-биарильных производных бензофуоро[1,2] diazepинов

Муратов А.В., Ересько А.Б., Берестнева Ю.В., Ракиша Е.В.
ГУ ИНФОРУ, Донецк

В работе представлены результаты комплексного исследования структуры и параметров ЯМР спектров ряда новых 1,4-биарильных производных бензофуоро[1,2] diazepинов.

Структурные закономерности синтеза полимер-темплатированных SiO₂-TiO₂ наноматериалов

Мусаев Х.Б., Атамуродова С.К., Шерматов Д.К., Рузимурадов О.Н., Акбаров Х.И.

Национальный университет Узбекистана им. Мирзо Улугбека, Ташкент

Синтезированы и исследованы силикагель и силикагель-титановые материалы через золь-гель реакции тетраэтоксисилана и титан (IV)-n- бутоксида в присутствии полиэтиленгликоля в качестве темплата или структурообразующего агента.

Структурные и сорбционные характеристики ионитов на основе поливинилхлорида

Жураев М.М.¹, Кутлимурадов Н.М.¹, Бекчанов Д.Ж.¹, Мухамедиев М.Г.²

1. Чирчикский государственный педагогический институт Ташкентской области

2. Национальный университет Узбекистана им. Мирзо Улугбека

Для анионита и полиамфолита на основе гранулированного ПВХ пластиката определены величины удельной поверхности слоёв полимера, размера и

общий объём пор. Установлено высокое сродство анионита к дихромат ионам и молекулярному йоду, а полиамфолита к ионам металлов в следующей последовательности $\text{In(III)} < \text{Ni(II)} < \text{Cu(II)}$.

Синтез эффективных катализаторов и адсорбентов для переработки жидкого и газообразного углеводородного сырья

Насуллаев Х.А.^{1,2}, Юнусов М.П.², Ибодуллаев С.А.¹, Худайбергенов А.А.¹, Гуломов Ш.Т.¹

¹Узбекский научно-исследовательский химико-фармацевтический институт, Ташкент. Узбекистан.

²Национальный Университет Узбекистана им. М.Улугбека

В работе исследовано фазовый состав носителей и катализаторов, определено валентное состояние ионов переходных металлов в оксидной форме образцов, обсуждена роль размерного фактора в формировании активной фазы Ni-Mo и Ni-Mo-W катализаторов с точки зрения активности и стабильности.

Эффект размера активной фазы и природы носителя в катализе конверсии биооксигенатов на иммобилизованных частицах золота

Николаев С.А.¹, Эжзеленко Д.И.¹, Егоров А.В.¹, Чумакова Н.А.¹, Чистяков А.В.², Арапова О.В.², Жарова П.А.², Губанов М.А.²

1. Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

2. Институт нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева РАН, Москва

Изучен эффект размера активной фазы и природы носителя в катализе конверсии биооксигенатов на иммобилизованных частицах золота.

Селективный гидрогенолиз глицерина в пропиленгликоль-1,2 на ультрадисперсных частицах меди

Николаев С.А.¹, Эжзеленко Д.И.¹, Егоров А.В.¹, Чумакова Н.А.¹, Чистяков А.В.², Арапова О.В.², Жарова П.А.², Губанов М.А.², Дмитриев Г.С.²

1. Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

2. Институт нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева РАН, Москва

Изучен гидрогенолиз глицерина в пропиленгликоль-1,2 в присутствии 60% медных катализаторов, полученных со-осаждением из нитратов меди и алюминия с помощью NH_4OH и NaOH и прокаленных при 450 и 900 °С.

Наноразмерные каталитические суспензии на основе железа, обладающие пониженной селективностью по диоксиду углерода в синтезе Фишера-Тропша в сларри-реакторе

Норко С.И., Дементьева О.С., Куликова М.В.
ИНХС РАН, Москва

Установлено, что введение в качестве модифицирующих добавок к железосодержащим катализаторам синтеза Фишера-Тропша в условиях системы газ-жидкость-твердое тело приводит к подавлению вторичной реакции водяного газа. Установлено влияние природы модифицирующей добавки на фракционный состав образующихся углеводородов и выход спиртов C₂-C₄.

Исследование методами колебательной спектроскопии изменений в процессе превращения лигнина под влиянием СВЧ-излучения

Паланкоев Т.А.¹, Арапова О.В.¹, Рощупкина Д.А.², Цодиков М.В.¹
¹ ИНХС РАН, Москва
² ИБМХ РАН, Москва

Данные полученные методами колебательной спектроскопии хорошо сопоставимы с результатами углекислотного риформинга лигнина по выходу целевых продуктов H₂/CO. Использование методики высокотемпературной ИК спектроскопии диффузного отражения *in situ* позволило обнаружить выделение смеси ванилиновых производных, которое зависит от способа нанесения никеля.

Изучение каталитического крекинга ацетона и углеводородов методом *in situ* ИК-Фурье спектроскопии.

Паланкоев Т.А., Дементьев К.И.
ИНХС РАН им. А.В. Топчиева, Москва

В данной работе проведено исследование закономерностей протекания каталитического крекинга ацетона и углеводородов различных классов с применением ИК-Фурье спектроскопии. Показано взаимное влияние кислородсодержащего соединения и углеводорода на закономерности их превращения на цеолитных катализаторах. Работа выполнена в рамках Государственного задания ИНХС РАН.

Влияние природы структурных свойств носителя Fe – содержащих катализаторов синтеза Фишера-Тропша (СФТ) на динамику топохимических процессов с участием синтез-газа.

Панкина Г.В., Чернавский П.А., Шумянецев А.В., Лунин В.В.
Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва

В настоящей работе изучено влияние структурных свойств прекурсора на примере крупнопористой и мелкопористой алюмо-магниевого шпинелей (АМШ) на кинетику образования соединений железа в процессе активации катализаторов 15 масс.% Fe₂O₃/АМШ с добавкой 2% калия синтез-газом H₂/CO. Показано, что при активации Fe/АМШ и FeK/АМШ в токе CO/H₂ для всех катализаторов наблюдается образование карбида Хэгга χ - Fe₅C₂ с T₀ = 257°C. Установлено, что на количество образовавшегося карбида Хэгга влияет пористая структура носителя.

Гомогенно – каталитическое винилирование карбоновых кислот

Парманов А.Б., Нурмонов С.Э., Мавлоний М.И., Абдуллаев Ж.У.
Национальный университет Узбекистана, г. Ташкент.

Исследовано каталитическое винилирование 2-гидроксиэтановой кислоты ацетиленом в условиях гомогенного катализа, с образованием соответствующего винилового эфира. Изучено влияние природы катализатора на выход продукта.

Каталитические свойства низкоконцентрированных Fe-содержащих суспензий в синтезе углеводородов по методу Фишера-Тропша в сларри-системе

Пономарева А.К., Дементьева О.С., Куликова М.В.
ИНХС РАН, Москва

Изучены свойства наноразмерных Fe-содержащих суспензий и установлено влияние температуры деструкции растворов прекурсоров металлов на физико-химические и каталитические свойства образцов. В ходе выполнения работы была показана возможность управления селективностью процесса образования жидких углеводородов по методу Фишера-Тропша посредством варьирования температуры формирования контактов и изменения адсорбционной способности активных центров катализаторов.

Сравнительное исследование реакции [2+2]фотоциклоприсоединения в двух стирилбензохинолиновых диадах, образующих циклобутаны с вицинальными бензохинолиновыми заместителями

Поташова Н.И.¹, Гавришова Т.Н.¹, Будыка М.Ф.¹, Федулова Ю.А.²

¹ИПХФ РАН, г. Черноголовка,

²МГУ им. Ломоносова, ФФФХИ

Показано, что в циклобутанах, образующихся из стирилбензохинолиновых диад, преимущественное протекание фотофизического (излучение эксимера) или фотохимического (раскрытие цикла) процесса зависит от структуры исходной диады.

Синтез и фотохимические свойства несимметричной диады, в которой два стирилбензохинолиновых фотохрома связаны с 2,3-нафтиленовым "каркасом" мостиками разной длины

Поташова Н.И., Гавришова Т.Н., Будыка М.Ф.

ИПХФ РАН, Черноголовка

Найдено, что в новой диаде, как и в исследованных ранее стирилбензохинолиновых диадах, протекают две конкурентные реакции – *транс-цис* фотоизомеризация и [2+2]фотоциклоприсоединение с образованием тетразамещенного циклобутана.

Зависимость тепловых колебаний нановключения жидкого свинца на дислокации в алюминии от температуры

Прокофьев С.И.¹, Йонсон Э.²

1. ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия

2. Center for Quantum Devices, NBI, Copenhagen, Denmark

С помощью ПЭМ исследованы *in-situ* поперечные тепловые осцилляции 15 нм включения жидкого Рb на закрепленной дислокации в Al. Показано, что стандартное смещение включения уменьшается при повышении температуры, что связано с увеличением эффективного линейного натяжения дислокации. Возможной причиной этого является образование на дислокации жидкой фазы.

Шкала полярности липидов согласно элюирующей силе растворителя

Пчёлкин В.П.

ФГБУН ИФР РАН, Москва

С помощью пар стандартных «реперных» соединений, находящихся на самых границах широкого диапазона полярности, найдены фиксированные значения сравнительной гидрофильности разных классов липидов. Её расчётные уровни

для пар гексадекан – глицерин и лецитин-кефалин при жидкостной хроматографии липидов не зависят от состава подвижных фаз.

Особенности процесса гибели фотогенерированных носителей тока в медь-дефицитных твердых растворах $\text{Cu}_{1-x}(\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3})\text{Se}_2$

Рабенюк Е.В.¹, Новиков Г.Ф.^{1,2}

1. Институт Проблем химической физики РАН, Черноголовка
2. Факультет физико-химической инженерии МГУ, Москва

Исследована кинетика гибели фотогенерированных носителей тока в $\text{Cu}_{1-x}(\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3})\text{Se}_2$ ($0 < x < 0.35$) методом микроволновой фотопроводимости. Обнаружено, что с уменьшением содержания меди наблюдается уменьшение времени жизни носителей тока, обусловленное образованием глубоких электронных ловушек, например, вакансий V_{Cu} .

Синтез и исследования электрофизических свойств в крупнокристаллических монокристаллических порошках $\text{Cu}_{1.5}\text{Zn}_{1.15}\text{Sn}_{0.85}\text{Se}_4$ и $\text{Cu}_{1.5}\text{Zn}_{1.15}\text{Sn}_{0.85}\text{S}_4$

Рабенюк Е.В.¹, Варсеев Д.Н.², Гапанович М.В.¹, Голованов Б.И.¹, Новиков Г.Ф.^{1,2}

1. Институт Проблем химической физики РАН, Черноголовка
2. Факультет физико-химической инженерии МГУ, Москва

Синтезированы и изучены электрофизические и оптические свойства крупнокристаллических монокристаллических порошков CZTS и CZTSe. Обнаружено, что характеристические времена спадов для селенистых кестеритов больше (150 – 200 нс), чем для сернистых (<10 нс).

Получение стехиометрической, ориентированной пленки Ag_2Se лазерной абляцией

*Разумцев А.А., Тверьянович Ю.С., Фазлетдинов Т.Р., Тверьянович А.С.,
Борисов Е.Н.*

СПбГУ, Санкт-Петербург

Изучены причины возникновения дефицита селена при получении тонких пленок Ag_2Se импульсным лазерным напылением. Впервые была получена стехиометрическая и строго ориентированная тонкая пленка селенида серебра методом лазерной абляции путем введения 20 ат.% избытка селена в мишень.

Исследование условий образования кестеритной фазы методом CBD на различных подложках

Ракитин В.В.¹, Варушкин П.Э.¹, Новиков Г.Ф.^{1,3}

1. ИПХФ РАН, г. Черноголовка
3. МГУ им. Ломоносова, г. Москва

В данной работе изучены условия образования кестеритной фазы на различных подложках, используя метод CBD. Показано, что полученные образцы обладают структурой типа кестерита в не зависимости от типа подложек с незначительным содержанием примесных фаз SnS и Sn₂S₃. Установлено, что при увеличении концентрации меди в прекурсорном растворе, образуются пленки CZTS с минимальным содержанием примесных фаз. По всей видимости, зависимость свойств получаемых материалов от типа применяемой подложки может наблюдаться в приграничном слое кестерит/подложка, а не на поверхности образца.

Измерение морфологических характеристик клеток HeLa при фотодинамическом воздействии методом голографической томографии

*Рогова Д.А.^{1,2}, Белашов А.В.², Беляева Т.Н.³, Корнилова Е.С.³, Семенова И.В.²,
Васютинский О.С.²*

1. СПбПУ, Санкт-Петербург
2. ФТИ им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург
3. Институт Цитологии РАН, Санкт-Петербург

В работе представлены результаты мониторинга изменений морфологических характеристик живых клеток через 24 часа после фотодинамического воздействия методами цифровой голографической томографии.

Низкомолекулярные сополимеры этилена со фтормономерами

*Родин В.М., Кулаченков С.А., Новикова А.А., Корнилова Т.А., Ловчиков В.А.,
Емельянов Г.А.*

ФГУП «НИИСК», Санкт-Петербург

В работе исследованы низкомолекулярные сополимеры этилена с фторированными мономерами (винилиденфторид, трифторхлорэтилен, тетрафторэтилен, гексафторпропилен). Рассмотрен стохастический механизм формирования их макроцепи и определены параметры моделей роста. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-60033 мол_а_дк.

Кластер кристаллизационных установок для выращивания водорастворимых кристаллов

Волошин А.Э.¹, Егоров В.В.², Калинин А.П.³, Маноменова В.Л.¹, Родионов А.И.⁴, Родионов И.Д.⁴, Родионова И.П.⁴, Руднева Е.Б.¹

1. ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва
2. ИКИ РАН, Москва
3. ИПМEX РАН, Москва
4. ИХФ РАН, г. Москва

Приводится описание большого автоматизированного кластера кристаллизационных установок, включающего в себя 22 малых кластера, каждый из которых содержит десять кристаллизационных установок. Рассматриваются вопросы конструкции и функционирования кристаллизационных установок, объединения их в кластеры, а также управления работой установок, в том числе дистанционного, посредством выхода в Интернет.

Исследование проникновения пламени разбавленной метано-кислородной смеси через препятствия, содержащие палладий

Рубцов Н.М.¹, Калинин А.П.², Цветков Г.И.¹, Трошин К.Я.³, Родионов А.И.³

1. ИСМАН РАН, Московская область
2. ИПМEX РАН, Москва
3. ИХФ РАН, г. Москва

Методом скоростной киносъемки исследовано проникновение пламени разбавленной метано-кислородной смеси через препятствия, содержащие мелкоячеистые железные сетки с расположенными на них витками Pd проволоки.

Изучение прохождения УФ-С излучения через атмосферу

Егоров В.В.¹, Калинин А.П.², Родионов А.И.³, Родионов И.Д.³, Родионова И.П.³

1. ИКИ РАН, Москва
2. ИПМEX РАН,
3. ИХФ РАН, г. Москва

Приводится описание экспериментов и их результатов, касающихся изучения ослабления волн УФ-С диапазона в приземной атмосфере. В качестве источника УФ-С излучения использовалась эксимерная лампа, а приемником служил монофотонный сенсор «Скорпион». Выявлено, что значения показателя ослабления волн УФ-С диапазона составили от 0,2 до 0,5 км⁻¹.

Синтез мультиблок-сополимеров норборнена и циклооктенов с кислородсодержащими заместителями реакцией полимерного кросс-метатезиса

*Роевко А.В., Денисова Ю.И., Грингольц М.Л., Шандрюк Г.А., Кудрявцев Я.В.,
Финкельштейн Е.Ш.
ИНХС РАН, Москва*

Впервые осуществлен полимерный кросс-метатезис между полинорборненом и рядом кислородсодержащих производных полициклооктена. Синтезированы и охарактеризованы новые мультиблок-сополимеры. Изучены превращения активных центров реакции, а также термические свойства полученных сополимеров.

Каталитический крекинг нефтяных фракций в присутствии соединений вольфрама, сформированных *in situ*

*Ромазанова Д.А.^{1,2}, Абрамова Д.С.^{1,2}, Дементьев К.И.¹, Хаджиев С.Н.¹
1.ИНХС РАН, Москва
2.МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва*

Исследованы закономерности формирования наноразмерных вольфрамсодержащих эмульсий с нефтяными фракциями в качестве дисперсионной среды. Показано, что присутствие в сырье крекинга наноразмерных вольфрамсодержащих частиц приводит к интенсификации реакций гидрирования и увеличению глубины крекинга.

Превращение смешанного лигнина в синтез-газ при стимулировании микроволновым излучением

*Рошупкина Д.А.¹, Арапова О.В.², Паланкоев Т.А.², Цодиков М.В.²
¹ИБМХ РАН, Москва
²ИНХС РАН, Москва*

В настоящей работе представлены результаты по переработке лигнина при микроволновом облучении. Обнаружено, что в процессе углекислотного риформинга лигнина, содержащего 1,5 мас.% никеля, при стимулировании микроволновым излучением скорость образования синтез газа составляет 86 см³/г*мин с соотношением СО/Н₂ ~ 1.

Фотоиндуцированные процессы и магнитные спиновые эффекты в полимерных пленках композитов с микрокристаллами рубрена и магнитными наночастицами при лазерном возбуждении

Румянцев Б.М.¹, Берендяев В.И.², Пибалк А.В.², Леонтьев В.Л.³

¹ИБХФ РАН, Москва

²ГНЦ НИФХИ, Москва

³ИМЕТ РАН, Москва

Исследовано влияние лазерного облучения (532 нм) на спиновый магнитный эффект (СМЭ) в полях СВ диапазона при комнатной температуре и его декремент в присутствии магнитных наночастиц (МНЧ) в критическом состоянии для фотопроцессов (люминесценция, фотогенерация носителей тока) в пленках тройных композитов (полиалканэфириимид+ рубрен + МНЧ).

Влияние электрического и магнитного полей на фотопроцессы с участием ион-радикальных пар в полимерных фотопроводниках

Румянцев Б.М.¹, Берендяев В.И.², Пибалк А.В.²

¹ИБХФ РАН, Москва

²ГНЦ НИФХИ, Москва

В работе обнаружено и исследовано влияние электрического и слабого магнитного поля при комнатной температуре (спиновые магнитные эффекты) на фотопроцессы (фотогенерация заряженных носителей, люминесценция, необратимые фотохимические процессы) в пленках полимерных фотопроводников на основе комплексов с переносом заряда с сопряжением в донорной и акцепторной компонентах (полимерные КПЗ, полиимиды)

Синтез олефинов из продуктов синтеза Фишера-Тропша в присутствии цеолитсодержащих катализаторов

Сагарадзе А.Д.^{1,2}, Паланкоев Т.А.¹, Дементьев К.И.¹

1. ИНХС РАН им. А.В. Топчиева, Москва

2. МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Работа посвящена синтезу олефинов из продуктов синтеза Фишера-Тропша путём каталитического крекинга на цеолитсодержащих катализаторах. Установлена связь между содержанием алкенов в сырье и выходом низших олефинов. Показано, что увеличение доли цеолита типа Y в катализаторе повышает селективность по бутену и пропену.

Ингибированное окисление липосом фосфатидилхолина в водной среде

Сажина Н.Н., Пальмина Н.П., Семенова М.Г.
ИБХФ РАН, Москва

В настоящей работе проведено исследование инициированного окисления липосом ФХ в водной среде при разных температурах и с встраиванием в них ненасыщенной ω -3 альфа-линоленовой ЖК, а также ингибирование окисления липосом фенольными соединениями гвоздичного масла и инкапсулированием их казеином натрия. Результаты работы могут быть использованы при разработке современных функциональных продуктов питания на основе липосом ФХ.

Локальная характеристика оксидного слоя титанового покрытия на поверхности высокоориентированного пиролитического графита методами АСМ и СТМ/СТС

Сарвадий С.Ю., Дохликова Н.В., Харитонов В.А., Гришин М.В., Шуб Б.Р.
ИХФ РАН, Москва

Методами атомно-силовой и сканирующей туннельной микроскопии были определены особенности морфологии и локальной электронной структуры оксидного слоя титанового покрытия, синтезированного методом терморезистивного напыления на поверхности высокоупорядоченного пиролитического графита.

Моделирование процессов переконденсации методом Монте-Карло на примере системы из 100 наночастиц Au₁₀₀

Свалова А.И., Стищенко П.В.
ОмГТУ, Омск

Методом Монте-Карло моделируется процесс переконденсации для системы из 100 наночастиц Au₁₀₀ икосаэдрической формы, при различных температурах в диапазоне от 300 до 1400 К. Количество НЧ при всех температурах аппроксимируется функцией вида $y = a * x^b$, $b \approx -0.3$ для всех температур, коэффициент a быстро убывает и стремится к асимптоте $y = 0$.

Адсорбционные явления в системе кукурбит[7]урил+ферроцен на межфазной границе электрод/раствор

Свиридова Л.Н.^а, Стенина Е.В.^а, Стенин В.Ф.^б

^а Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова

^б МЦАИ РАН

Показано, что комплекс CB7 ⊂ Fc, образующийся в системе CB(7)+Fc+ Na₂SO₄ путем включения Fc в гидрофобную полость CB7, одновременно формирует

комплекс с катионом Na^+ за счет его взаимодействия с карбонильными группами порталов. При отрицательных и малых положительных зарядах поверхности адсорбционный слой формируется преимущественно катионным комплексом, а с ростом положительного заряда в образовании слоя адсорбата принимают участие нейтральные комплексы $\text{CV}7 \subset \text{Fc}$.

Полимерные материалы на основе ненасыщенного поликетона, отверждаемого динитрилоксидом

Сидоров О.И.¹, Евсеев Н.Е.¹, Дубков К.А.²

1. ФГУП ФЦДТ «Союз», город Дзержинский, Московская область
2. Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, город Новосибирск

Изучены свойства ненасыщенного поликетона - представителя нового типа реакционноспособных олигомеров и полимерных материалов на его основе. Показано, что для полимерных материалов на основе ненасыщенного поликетона при снижении температуры испытаний характерно повышение деформации при разрыве.

Исследование NiCr-SiO₂ катализаторов на стабильность и активность в гидрировании модельного соединения бионефти – анизола

Смирнов А.А.^{1,2}, Сухоруков Д.А.², Шилов И.Н.^{1,2}

1. Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, г. Новосибирск
2. Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск

Исследование свойств Ni-SiO₂ и NiCr-SiO₂ катализаторов гидродеоксигенации показало, что введение хрома в их состав приводит к повышению активности в гидрировании анизола и росту коррозионной стойкости образцов. Установлено, что 10 масс.% Cr в составе Ni-Cr является оптимальной добавкой для повышения активности катализатора.

Изучение кальциевой сигнализации в одиночных тромбоцитах.

Спирёва Д.В.¹, Москаленский А.Е.^{1,2}, Кармацких О.Ю.¹, Воробьев А.Ю.^{1,3}

¹НГУ, Новосибирск

²ИХКГ им. В.В. Воеводского СО РАН, Новосибирск

³НИОХ им. Н.Н. Ворожцова СО РАН, Новосибирск

Для диагностики и лечения необходимо иметь понимание фундаментальных механизмов, лежащих в основе функций тромбоцитов. Мы представляем метод изучения одиночных тромбоцитов оптически, без необходимости смешивания реагентов. Представленный метод может дать новые фундаментальные знания о функциях тромбоцитов.

Полимер-полимерные смеси сверхвысокомолекулярного и низкомолекулярного полиэтиленов: синтез и свойства.

*Старчак Е.Е., Ушакова Т.М., Гостев С.С., Крашенинников В.Г.,
Гринев В.Г., Новокионова Л.А.
ИХФ РАН, Москва*

Непосредственно в синтезе, методом двухстадийной последовательной полимеризации на гомогенном металлоценовом катализаторе $\text{Me}_2\text{SiInd}_2\text{ZrCl}_2/\text{MAO}$ получены полимер-полимерные смеси на основе сверхвысокомолекулярного и низкомолекулярного полиэтиленов высокой плотности. Изучены их морфология и физико-механические свойства.

Адаптация модели Хьюи-Хамелека для процесса полимеризации метилметакрилата в массе

Султанова А.А.^{1,2}, Султанов Р.А.³

1. АН РБ, Уфа
2. БашГУ, Уфа
3. МКУ «ЦИТ», Уфа

Реализовано программное обеспечение, позволяющее с приемлемыми затратами машинного времени имитировать процесс радикальной полимеризации метилметакрилата в массе с учетом гель-эффекта. Путем моделирования были определены кинетические параметры реакций, протекающих в процессе полимеризации метилметакрилата в присутствии перекиси бензоила и азобисизобутиронитрила.

Способы учёта водородной связи в полуэмпирических расчётах термодинамических характеристик при физической адсорбции спиртов и аминов

Терентьев А.В.¹, Варфоломеева В.В.¹, Ульянов А.В.², Манжелей Е.А.³

1. Самарский университет, Самара
2. ИФХЭ РАН, Москва
3. 25 ГосНИИ химмотологии Минобороны России, Москва

Рассмотрены потенциалы взаимодействия кислорода и азота с поверхностью графитированной термической сажи. Показано, что выбор формы потенциала должен быть теоретически обоснованным. При адсорбции молекул способных образовывать водородную связь следует применять потенциалы, учитывающие направленность.

Численное и экспериментальное исследование поступательной неравновесности и влияния малых добавок Хе на порог детонации смеси O_2-H_2-He

Куликов С.В., Терновая О.Н., Червонная Н.А.
ИПХФ РАН, г. Черноголовка

Численно и экспериментально изучалось влияние малой добавки Хе на возникновение детонации в падающей ударной волне. Это приводило к смещению порога срыва детонации в область более слабых ударных волн, что является следствием возникновения специфической поступательной неравновесности во фронте волны.

Конформационный анализ цитоплазматического домена калнексина для моделирования интерфейса взаимодействия с белком Nef

Ткачѳв Я.В., Анашкина А.А., Аджубей А.А.
Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, Москва

Проведено моделирование наиболее стабильной конформации калнексина с использованием метода молекулярной динамики и набора статистических методов. Рассчитанная структура была использована для определения интерфейса взаимодействия с белком ВИЧ Nef, участвующим в патогенезе ассоциированных нейрокогнитивных нарушений.

Квантово-химическое моделирование реакции гомолиза трет-бутилгидропероксида

Туровский Н.А.¹, Туровская М.К.², Павленко Р.Р.¹
¹ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», Донецк
²ГУ«ИНФОУ», Донецк

Исследована конформационная подвижность трет-бутилгидропероксида и ППЭ реакции его гомолиза. Определены транс- и цис- барьеры внутреннего вращения, которые равны 3.4 и 32.9 кДж/моль соответственно. На пути реакции гомолиза tBuOOH локализовано переходное состояние (TS) при $O...O$ - межъядерном расстоянии 2.68 ± 0.02 Е.

Разработка СВС мембраны для процесса дегидрирования бутиленов в бутадиены.

*Уваров В.И.¹, Алымов М.И.¹, Лорян В.Э.¹, Уваров С.В.¹, Боровинская И.П.¹,
Шустов В.С.¹, Федотов А.С.², Цодиков М.В.²*
1. ¹ИСМАН РАН, г. Черноголовка, МО
2. ²ИНХС РАН, г. Москва,

Работа посвящена синтезу каталитически активных мембран для дегидратации и дегидрированию бутилового спирта с получением водорода и бутадиена,

служащего основой для получения синтетических смол, каучука, пластмассы, химических волокон, фармацевтических препаратов, душистых веществ и др.

Кинетика разложения фенола на поверхности шунгита

Полунина И.А., Полунин К.Е., Ульянов А.В., Буряк А.К.
ИФХЭ РАН, Москва

Представлены результаты хромато-масс-спектрометрических исследований взаимодействия фенола с шунгитом в водных растворах. Дана количественная оценка влияния шунгита на скорости разложения фенола и образования продуктов его трансформации. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ грант № 18-08-01224-а

Разложение гидразина на поверхности шунгитового материала

Ульянов А.В., Полунина И.А., Полунин К.Е., Буряк А.К.
ИФХЭ РАН, Москва

Представлены результаты хромато-масс-спектрометрических исследований взаимодействия гидразина с шунгитовым материалом. Дана оценка влияния внешних факторов на скорости разложения гидразина и образования продуктов его трансформации. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 18-08-01224а)

Стеклообразование в системе $\text{GeSe}_2 - \text{As}_2\text{Se}_3 - \text{Sb}_2\text{Se}_3 - \text{Ag}_2\text{Se}$

Фазлетдинов Т.Р., Тверьянович Ю.С., Бальмаков М.Д.
СПбГУ, Санкт-Петербург

Стекла являются удобными системами для изучения различных межфазных взаимодействий. В ходе исследований удалось получить аморфные образцы в системе селенидов германия, мышьяка, сурьмы и серебра. Была обнаружена и объяснена зависимость значения температуры размягчения стекла от химического состава образцов.

Первый лиганд фосфитной природы для металлокатализа на основе псевдодипептида

*Фирсин И.Д., Чучелкин И.В., Жеглов С.В., Гаврилов В.К., Новиков И.М.,
Ширяев А.А., Гаврилов К.Н.*
РГУ имени С.А. Есенина, г. Рязань

Рассмотрено получение диамидофосфитного производного псевдодипептида, содержащего стереогенный атом фосфора в составе 1,3,2-диазафосфо-

лидинового цикла, а также его применение в асимметрических Pd-катализируемых реакциях аллильного замещения и в Rh-катализируемой реакции гидрирования.

Новые катион-радикальные соли BEDT-TTF с анионами на основе галогенидов сурьмы(III)

Флакина А.М.¹, Шилов Г.В.¹, Жилыева Е.И.¹, Ван К.В.², Любовская Р.Н.¹

1. Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка
2. Институт экспериментальной минералогии РАН, Черноголовка

Получены проводящие катион-радикальные соли BEDT-TTF с анионами на основе галогенидов сурьмы(III): $(\text{BEDT-TTF})_6\text{Sb}_x\text{Cl}_{12}$ ($x \sim 2.8$) и $(\text{BEDT-TTF})_2\text{SbI}_4 \cdot \text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$. Обе соли являются полупроводниками. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 16-03-01103) и Государственного задания, № гос. регистрации 0089-2014-0036.

Молекулярный дизайн каталитических систем в реакциях с участием норборнадиена

Флид В.Р., Шамсиев Р.С., Морозова Т.А., Дураков С.А.

Российский технологический университет, МИТХТ им. М.В. Ломоносова,
Москва

Разработаны новые технологичные металлокомплексные гомогенные и гетерогенные катализаторы для реакций с участием норборнадиена. Сочетание теоретических и экспериментальных подходов позволило осуществить молекулярный дизайн каталитических систем, детализировать механизмы, оптимизировать условия протекания реакций.

Физико-химические свойства двухкомпонентных нанокатализаторов на основе борорганических и платиновых наночастиц.

Харитонов В.А.¹, Уласевич С.А.², Сарвадий С.Ю.¹, Гришин М.В.¹, Гатин А.К.¹, Шуб Б.Р.¹

1. ИХФ РАН, Москва
2. ИОНХ НАН Беларуси, Минск

Морфология и строение двухкомпонентных нанокатализаторов на основе борорганических и платиновых наночастиц исследованы средствами сканирующей туннельной и атомно-силовой микроскопии. Химические свойства нанокатализаторов на примере реакции разложения аммиака установлены с использованием сканирующей туннельной спектроскопии и масс-спектрометрии в вакууме.

Физико-химические характеристики изолированных отрицательных ионов конденсированного производного трихиноила по данным масс-спектрометрии резонансного захвата электронов

*Хатымов Р.В.¹, Муфтахов М.В.¹, Панкратьев Е.Ю.¹, Якущенко И.К.²,
Ярмоленко О.В.²*

¹ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа

²ИПХФ РАН, г. Черноголовка Московской области

Исследованы отрицательные ионы (ОИ) перспективного для создания органических катодных материалов соединения НМНАТА. Обнаружены "медленные" процессы распада (метастабильных) ОИ, из анализа которых оценены величина электронного сродства молекулы и энергия диссоциации связей O–CH₃ в молекулярном ОИ и нейтральной молекуле.

Фрагментация молекул гистидина в резонансных электрон индуцированных реакциях

*Щукин П.В., Хатымов Р.В., Муфтахов М.В.
ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа*

Методом масс-спектрометрии отрицательных ионов исследованы газофазные реакции резонансного присоединения свободных низкоэнергетических электронов молекулами протеиногенной аминокислоты – гистидина. Выявлены специфические особенности процессов диссоциативного распада образующихся молекулярных отрицательных ионов.

Устойчивость молекул аза-производных полициклических ароматических углеводородов в свете низкоэнергетических электронно-молекулярных столкновений

*Хатымов Р.В.¹, Муфтахов М.В.¹, Хатымова Л.З.¹, Якущенко И.К.²,
Ярмоленко О.В.²*

¹ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа

²ИПХФ РАН, г. Черноголовка Московской области

Методом масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов изучена фрагментационная и автонеутрализационная стойкость изолированных молекулярных отрицательных ионов аза-производного полициклического ароматического углеводорода 5,6,11,12,17,18-гексаазатринафтилена (НАТНА)

Орбитальный подход при объяснении механизма специфического эффекта полярного растворителя в спектрах оптического поглощения

Цеплин Е.Е., Цеплина С.Н., Хвостенко О.Г.
ИФМК УФИЦ РАН, Уфа

Показано, что сдвиги полос в спектрах поглощения ряда хинонов в полярном растворителе по сравнению с неполярным происходят вследствие изменений энергетических щелей между соответствующими ЗМО и ВМО, происходящих при образовании водородного комплекса молекулы с молекулами полярного растворителя.

Влияние полярного растворителя на полосы поглощения изомеров хлорфенола

Цеплина С.Н., Цеплин Е.Е., Хвостенко О.Г.
ИФМК УФИЦ РАН, Уфа

Показано, что батохромные сдвиги первой и второй $\pi\pi^*$ полос поглощения в растворе метанола по сравнению с газовой фазой, обусловлены образованием водородной связи между молекулой хлорфенола и молекулой метанола и воздействием на образовавшийся водородный комплекс среды растворителя.

Формирование Cu-Co-содержащих каталитических суспензий для получения оксигенатов из синтез-газа

Чудакова М.В., Иванцов М.И., Куликова М.В.
ИНХС РАН, Москва

Методом капельного термолиза сформирована серия наноразмерных стабильных Cu-Co-содержащих суспензий. Установлено влияние условий формирования каталитических суспензий на их физико-химические и каталитические свойства в условиях реакции получения спиртов из синтез-газа в сларри-реакторе.

Разработка математической модели процесса обжига отработанного активированного угля

Шадрин Г.К., Куимов Д.В.

Восточный научно-исследовательский институт цветных металлов, г. Усть-Каменогорск, Казахстан

Построена ячеечная математическая модель процесса обжига золотосодержащего активированного угля обогатительных фабрик, позволяющая выявить закономерности собственно процесса сжигания,

отвлекаясь от геометрических размеров реактора. Выполнена параметрическая идентификация модели по данным лабораторных опытов.

Управление химическим процессом посредством его обратной математической модели

Шадрин Г.К., Шадрин М.Г.

Восточный научно-исследовательский институт цветных металлов, г. Усть-Каменогорск, Казахстан

Для управления процессом предложено компенсировать его динамику обратной математической моделью. При реализации управления используется эталонная система, которая определяет желаемый характер изменения переменных химического процесса. Представлены уравнения обратной модели, эталонной системы и алгоритма управления.

Фемтосекундная динамика переноса электрона в реакционном центре комплекса ядра фотосистемы 2 при низких температурах

*Шелаев И.В.¹, Гостев Ф.Е.¹, Забелин А.А.², Христин А.М.², Шувалов В.А.^{1,2},
Надточенко В.А.¹*

¹ИХФ РАН, Москва

²ИФПБ РАН, Пущино

В ходе исследования низкотемпературной зависимости кинетических характеристик первичных процессов переноса электрона в комплексах ядра фотосистемы 2 впервые было показано, что времена жизни образования и распада ион-радикальной пары $P680^+Pheo_{D1}^-$ уменьшаются с 17 до 8 пс при повышении температуры от 77 до 230 К. Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ №17-04-01717 и №17-00-00209, а так же РНФ №14-14-00789.

Фемтосекундная pump-probe спектроскопия элементарного акта фотохимических превращений в Na⁺ родопсинах

*Айбуш А.В.¹, Шелаев И.В.¹, Гостев Ф.Е.¹, Богачев А.В.², Мамедов М.Д.²,
Надточенко В.А.¹*

1. Институт Химической Физики им. Н.Н. Семенова РАН, г. Москва

2. Институт физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского МГУ, г. Москва

Методом фемтосекундной абсорбционной pump-probe спектроскопии проведено исследование недавно открытого ретиналь-содержащего белка,

осуществляющего уникальную функцию: трансмембранный перенос ионов натрия (Na^+ -rhodopsin, NaR) в процессе акта фотовозбуждения. Найдены характерные константы скорости фотопревращений, выявлена анизотропия сигнала на ранних временах.

Окисление монооксида углерода на Co-Ce-модифицированных цеолитах

Шилина М.И.¹, Бойченко А.Н.¹, Кротова И.Н.¹, Удалова О.В.²

1. МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва,
2. ИХФ имени Н.Н. Семенова РАН, Москва

В биметаллических Co-Ce-ZSM-5 наблюдается синергизм действия двух металлов в каталитическом окислении CO кислородом при температурах 50-250°C. Согласно методам РФЭС, ПЭМ, СЭМ, УФ-вид. ДО и ИК-спектроскопии на поверхности биметаллических катализаторов Co-Ce-ZSM-5 формируются структуры, в которых происходит взаимодействие между Co и Ce с образованием активных атомов кислорода.

Химические и биологические методы экспрессной интегральной оценки состояния поверхностных водных объектов суши, подвергающихся многофакторным антропогенным воздействиям

Штамм Е.В.¹, Скурлатов Ю.И.², Швыдкий В.О.¹

- ИБХФ РАН, г. Москва
ИХФ РАН, г. Москва

Проведен сравнительный анализ биологических методов контроля токсических свойств природной водной среды. В основу рассмотрения положены временной масштаб отклика на токсическое воздействие, возможность идентификации источников химического загрязнения, количественная оценка эффектов токсичности, чувствительность.

Влияние метода синтеза на активность Au-катализаторов конверсии этанола в бутанол-1

*Эжзеленко Д.И.¹, Николаев С.А.¹, Цодиков М.В.², Чистяков А.В.²,
Жарова П.А.², Сивенкова Е.В.¹*

1. Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва
2. Институт нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева РАН, Москва

С помощью ионного обмена (ИО) и пропитки (ПР) получены 0.5% образцы Au/Al₂O₃ и Au/TiO₂. Размер частиц Au изменяется в рядах: Au/Al₂O₃(ИО) <

Au/Al₂O₃(ПР); Au/TiO₂(ИО) < Au/Al₂O₃(ПР). На образцах одного химического состава выход бутанола растет с уменьшением размера частиц Au.

XAFS- исследование микроструктуры high-k диэлектрических элементов для мемристорных структур

*Эренбург С.Б.^{1,2}, Трубина С.В.¹, Исламов Д.Р.³, Гриценко В.А.³,
Квашнина К.О.^{4,5}*

1 ИНХ СО РАН, Новосибирск

2 ИЯФ СО РАН, Новосибирск

3 ИФП СО РАН, Новосибирск

4 ESRF, Grenoble, France

5 HZDR, Institute of Resource Ecology, Dresden, Germany

С использованием методов XAFS спектроскопии изучена микроструктура ряда возможных high-k диэлектрических элементов для мемристорных структур. Это оксиды HfO_x, ZrO_x, TaO_x с различными значениями “х”. Установлено, что образцы ZrO_x и HfO_x представляет собой смесь фаз оксидов ZrO₂ и HfO₂ и металлических циркония и гафния, соответственно.

Авторский указатель

Hsu S. L.-C., 63

А

Абдрахманов А.М., 53
Абдукаюмов Х., 50
Абдуллаев Ж.У., 93
Абдулов Х.Ш., 84
Абзаева К.А., 42
Абрамова Д.С., 58, 98
Аверьянов А.О., 51
Агафонов Г.Л., 51
Адамсон С.О., 69
Аджубей А.А., 103
Айбуш А.В., 82, 108
Акбаров Х.И., 50, 58, 90
Акентьева Н.П., 68
Акопджанян Т.Г., 30
Акульшин В.В., 31
Алдошин С.М., 61
Александров К.Ю., 76, 88
Алиджанов Э.К., 85
Альмов М.И., 41, 103
Алькаева Е.М., 56
Анашкина А.А., 103
Андреев С.М., 58
Андрианова З.С., 35
Аникин О.В., 59, 81
Антипин И.С., 32, 53
Арапова О.В., 59, 91, 92,
98
Аржакова О.В., 79
Аронзон Б.А., 33
Артюх А. А., 28
Астапенко В.А., 28
Атамурадова С.К., 90

Б

Бабкин Ю.А., 59
Баженова А.И., 80
Бажин Н.М., 42
Бакиров А.В., 83
Бакланов А.В., 36
Бальмаков М.Д., 104
Барачевский В.А., 26
Барашкова И.И., 59
Барелко В.В., 35
Басалаев А.А., 30
Баширов С.А., 67

Бегларян А.А., 60
Безрученко А.П., 55
Бекчанов Д.Ж., 49, 60, 90
Белашов А.В., 30, 36, 96
Беломоина Н.М., 61, 62,
63
Белоусов С.И., 83
Бельская О.В., 52
Беляева Т.Н., 30, 96
Бердинский В.Л., 31
Берендяев В.И., 99
Берестнева Ю.В., 61, 90
Берсенева А.А., 66
Беспалов В.Г., 36
Бессараб Ф.С., 69
Бессонова Н.П., 61
Бирин К.П., 66
Бирюкова Ю.К., 42
Богачев А.В., 108
Боднева В.Л., 28
Боженко К.В., 61
Бойченко А.Н., 109
Борисов Е.Н., 95
Боровинская И.П., 30, 103
Бревнов П.Н., 31
Бричкин С.Б., 31, 67
Брыжсин А.А., 49
Брюханов В.В., 76, 88
Будыка М.Ф., 32, 62, 86,
94
Бузин А.И., 34
Бузин М.И., 62
Булавченко О.А., 68
Булычева Е.Г., 61, 62, 63
Бурангулова Н.Ф., 53
Бурилов В.А., 32, 53
Буруева Д.Б., 48
Буряк А.К., 104
Бухтеко О.В., 80
Бухтияров В.И., 48, 52
Бучаченко А.Л., 26
Бучельников А.С., 63
Бычков В.Л., 69

В

Вайнер Б.Г., 26, 32
Валяхметова А.М., 32
Валкунас Л., 35
Ван В.К., 73

Ван К.В., 105
Варданян Г.А., 72
Варсеев Д.Н., 95
Варушкин П.Э., 96
Варфоломеев С.Д., 27
Варфоломеева В.В., 63,
102
Василик Н.Я., 51
Васильев В.Г., 62, 63
Васильюк Г.Т., 63
Вассерман Л.А., 59, 62, 64
Васютинский О.С., 30, 36,
96
Вдовиченко А.Н., 61
Вдовиченко А.Ю., 33
Веденкин А.С., 64, 65
Волков В.Т., 64
Волкова Н.Н., 65
Волошин А.Э., 97
Волчкова Е.С., 47
Вольнский А.Л., 79
Воробьев А.Х., 29
Воробьев А.Ю., 101
Воронцов П.С., 75
Втюрин Д.Н., 65, 89

Г

Гаврилов В.К., 33, 66, 104
Гаврилов К.Н., 33, 104
Гаврилов Ю.А., 31
Гаврилова Е.Л., 66
Гавришова Т.Н., 62, 86, 94
Гадомская А.В., 33
Гайсина А.Р., 58
Гайтко О.М., 66
Гак В.Ю., 67
Гак Л.Н., 35
Галиуллин Р.А., 37
Гапанович М.В., 67, 95
Гатин А.К., 33, 35, 67, 70,
71, 105
Гвоздева Е.Е., 37
Гельперина С.Э., 87
Герасимов Д.С., 89
Герасимов Е.Ю., 68
Гехман А.Е., 55
Гизатуллин А.Р., 68
Глазов С.В., 39
Глебов А.А., 88

Голованов Б.И., 95
Голубев В.К., 34, 68
Голубев Е.К., 31
Голубева Е.Н., 27, 71
Голубина Е.В., 49
Голубков Г.В., 69
Голубков М.Г., 35, 69
Гомберг М.А., 65
Гончаров А.Г., 88
Гончаров Е.А., 39
Горохов М.В., 40
Горшков В.А., 34, 89
Горшкова М.Ю., 48
Горячев Н.С., 68
Гостев С.С., 102
Гостев Ф.Е., 82, 108
Градов О.В., 83
Градова М.А., 83
Гребеничиков Ю.Б., 69
Гревцева И.Г., 85
Григоричева Э.К., 50
Григорьев И.А., 32
Григорьева Е.А., 65
Гринберг В.А., 88
Грингольц М.Л., 45, 98
Гринев В.В., 31
Гринев В.Г., 87, 102
Гриценко В.А., 27, 38, 110
Гришин М.В., 33, 35, 67,
70, 71, 100, 105
Громов В.Ф., 28
Громов О.И., 71
Губайдуллин И.М., 71
Губанов М.А., 91
Гудошников С.А., 69
Гуломов Ш.Т., 91
Гулюкина Н.С., 33
Гумаргалиева К.З., 78
Гуревич С.А., 40, 49, 70
Гусаров Д.С., 80
Гуцев Г.Л., 61
Гуцев Л.Г., 61

Д

Данильчик А.В., 65
Двуреченский А.В., 57
Дементьев К.И., 58, 59,
71, 92, 98, 99
Дементьева О.С., 48, 72,
92, 93
Демин В.А., 28

Демина В.А., 34
Денисова Ю.И., 45, 98
Дмитриев Г.С., 91
Добровольский Ю.А., 78
Дозморов С.А., 86
Долгова А.А., 79
Дорошенко И.А., 42
Дохлакова Н.В., 35, 71, 79,
100
Дубков К.А., 101
Дубовицкий В.А., 35
Дураков С.А., 53, 105
Дьяков Ю.А., 35

Е

Евсеев Н.Е., 101
Евстигнеев М.П., 63
Егоров А.В., 91
Егоров В.В., 97
Егорышева А.В., 66
Ельцов О.С., 63
Емельяненко В.Н., 52
Емельянов Г.А., 36, 96
Емец В.В., 88
Ересько А.Б., 90
Ермоленко Ю.В., 87
Ершов К.С., 36
Ефремов В.П., 37

Ж

Жарова П.А., 56, 72, 73,
91, 109
Жданова О.А., 78
Жеглов С.В., 66, 104
Жидомиров Г.М., 37
Жилинская Н.Т., 36
Жиляева Е.И., 73, 105
Жихорева А.А., 30, 36
Журавлева Т.С., 74, 83
Жураев М.М., 60, 90

З

Забелин А.А., 108
Завелев Д.Е., 37
Завьялов С.А., 33, 74
Загайнов И.В., 74
Зайковский В.И., 52
Зайцева Е.С., 37, 75
Захаров В.В., 75

Захаров В.М., 66
Захаров С.И., 75
Захарова Л.Я., 66
Звягина О.В., 75
Зенковец Г.А., 56
Зиборов В.С., 37
Зильберберг И.Л., 40
Зимарев В.С., 75
Зиновьев В.А., 57
Зиядуллаев О.Э., 76
Зотов А.В., 64
Зубавичус Я.В., 33
Зубкова Е.И., 76
Зулумян Н.О., 60
Зюбин А.Ю., 76, 88
Зюзин И.Н., 77

И

Ибодуллаев С.А., 91
Иванов А.И., 37
Иванова О.П., 74, 83
Иванцов М.И., 77, 107
Ивичева С.Н., 77, 78
Игнатов С.К., 38, 44, 46
Игнатъев В.К., 43
Иким М.И., 28
Илангован Р., 31
Ильющенков Д.С., 40
Илюшин М.А., 51
Ин Дачуан, 31
Исаакян А.Р., 60
Исламов Д.Р., 110
Исмаилов Э.Г., 51
Исмаилов Э.Г., 49
Исупова Л.А., 68
Ишемгулов А.Т., 85

Й

Йонсон Э., 94

К

Кабачий Ю.А., 82
Казарин В.В., 78
Калинин А.П., 97
Калинина И.Г., 78
Калинников Г.В., 39
Капралова Г.А., 38
Каргин Ю.Ф., 77, 78
Карелин А.И., 38

- Кармацких О.Ю., 101
 Карпач П.В., 63
 Карпушин А.А., 38
 Каюмов Р.Р., 78
 Квашинин Д.Г., 28
 Квашина К.О., 57, 110
 Кечекьян П.А., 79
 Кинзябулатов Р.Р., 54
 Кирдянкин Д.И., 66
 Кирман М.В., 79
 Кирсанкин А.А., 76, 79
 Киселёв А.В., 64
 Киселев В.Д., 39, 59, 81
 Кислов В.М., 39
 Клапётке Т.М., 68
 Ковалев А.И., 80
 Ковалев Д.Ю., 39
 Ковалев И.Д., 39
 Ковалева К.И., 89
 Ковальский В.Ю., 40
 Ковальчукова О.В., 80
 Ковтунов К.В., 48
 Ковтунова Л.М., 48
 Кожевин В.М., 38, 40, 49, 70
 Кожихова К.В., 58
 Кожушнер М.А., 28
 Козлова Н.В., 83
 Козловский А.В., 40, 50
 Кокорин А.И., 71
 Коледин С.Н., 71
 Коледина К.Ф., 71
 Колесникова А.О., 81
 Колесниченко Н.В., 44
 Колченко Н.Н., 33, 35
 Комова Н.Н., 59
 Кондратенко Т.С., 85
 Кононенко О.В., 64
 Константинов Г.И., 80
 Константинова Е.И., 88
 Коплак О.В., 83
 Коптелов А.А., 81
 Коптелов И.А., 81
 Коптюг И.В., 48
 Корман Д.Б., 42
 Корнилов Д.А., 59, 81
 Корнилова Е.С., 30, 96
 Корнилова Т.А., 82, 96
 Коробов А.И., 82
 Коробов М.В., 29
 Королева О.А., 42
 Коростелев Д.А., 54
 Костин А.Ю., 86
 Костров А.Н., 82
 Костюкевич Ю.И., 41
 Костюков А.А., 41, 42
 Коц Е.Д., 27
 Кочев С.Ю., 82
 Кочервинский В.В., 83
 Кочетков Р.А., 41, 43
 Кочубей С.А., 36
 Красоткина И.А., 31
 Крашенинников В.Г., 87, 102
 Крашенинников С.В., 34, 61
 Кременец В.А., 46
 Кривандин А.В., 64
 Кривелева А.С., 41
 Криничная Е.П., 74
 Кротова И.Н., 109
 Куверова В.В., 69
 Кудинова О.И., 87
 Кудрявцев Я.В., 45, 98
 Кузнецов Н.М., 83
 Кузьмин В.А., 41, 42
 Кузьмичев В.В., 30
 Куимов Д.В., 107
 Кулак А.И., 71
 Кулаченков С.А., 36, 96
 Куликов С.В., 103
 Куликова М.В., 72, 77, 92, 93, 107
 Кумскова Н.А., 87
 Куницына Е.И., 83, 86
 Куртикян Т.С., 84
 Курумов С.А., 44
 Кутлимурастов Н.М., 60, 90
 Кучинская П.А., 57
 Кюнзел М., 34
Л
 Лаврик Н.Л., 42, 84, 85
 Лантух Ю.Д., 85
 Лебедев Н.Г., 43
 Лебедева О.С., 43
 Левашов В.И., 64
 Левашов Е.А., 30
 Левин И.С., 73
 Левшин И.Б., 64
 Лемперт Д.Б., 77
 Леонова Л.Ю., 85
 Леонтьев В.Л., 99
 Летуца С.Н., 85
 Летуца У.Г., 31, 82, 85
 Ли В.М., 86
 Либерман Е.Ю., 66
 Лисина Т.Г., 41, 43
 Литвин А.А., 65
 Лихолобов В.А., 52
 Ловчиков В.А., 96
 Логинова А.С., 44
 Локтева Е.С., 49
 Лорян В.Э., 103
 Лукин В.Г., 54
 Лукин Л.В., 44
 Лукьянов Б.С., 63
 Лунин В.В., 27, 93
 Лысенков А.С., 77
 Львова Г.Л., 86
 Любимов Б.Я., 69
 Любовская Р.Н., 73, 105
 Ляпкосова И.А., 43
М
 Мавлоний М.И., 93
 Макаров Е.Г., 53
 Макарян И.А., 86
 Маклакова И.А., 87
 Маковийчук М.И., 44
 Максименко О.О., 87
 Максимова М.Г., 75
 Малащенко В.В., 88
 Малышев Н.С., 69
 Маляр И.В., 54
 Маматкулов Ш.И., 87
 Маматова А.А., 88
 Мамедов М.Д., 108
 Манжелый Е.А., 102
 Маноменова В.Л., 97
 Мартьянова Е.С., 80
 Маскевич С.А., 63
 Маслаков К.И., 49, 70
 Маслов Д.А., 88
 Матвеев В.Н., 64
 Матвеева К.И., 76, 88
 Матиева З.М., 44
 Медведев С.П., 45, 46, 90
 Медведева С.А., 66
 Мееров Д.Б., 45
 Меликян С.А., 60
 Мельников В.П., 89
 Мельников И.Н., 45

Менчикова Г.Н., 55
Меньшиков И.Н., 36
Меньшов С.А., 69
Местергази М.А., 42
Местергази М.Г., 41
Метелешко Ю.И., 55
Милёхин Ю.М., 81
Милосердов П.А., 89
Милосердова О.М., 89
Минасян А.С., 84
Миронова Д.А., 32, 53
Митряева Н.С., 89
Михалева М.Г., 65, 89
Михалкин В.Н., 90
Михеев П.В., 31
Михель И.С., 66
Михненко М.Д., 68
Моргунов Р.Б., 79, 83, 86
Морозов В.Н., 42
Морозов П.В., 74
Морозова Т.А., 105
Моронцев А.А., 45
Москаленский А.Е., 101
Муллоев Н.У., 85
Муравьёв Н.В., 45
Муратов А.В., 90
Мусаев Х., 50
Мусаев Х.Б., 90
Муфтахов М.В., 106
Мухамедиев М.Г., 49, 60,
90
Мухаметзянов Т.А., 81
Мышлявцев А.В., 89

Н

Надточенко В.А., 82, 108
Назарова Н.В., 46
Насуллаев Х.А., 57, 91
Наумов В.С., 46
Невидимов А.В., 46, 47
Невидимова А.Г., 47
Некпелова Т.Д., 42
Немухин А.В., 27, 55
Никифорова Г.Г., 62
Николаев Е.Н., 41
Николаев С.А., 49, 91, 109
Николаева Т.Н., 65
Никольский В.М., 47
Никольский С.Н., 89
Нитута А.Н., 75
Новиков Г.Ф., 67, 95, 96

Новиков И.М., 104
Новикова А.А., 96
Новикова Л.А., 47
Новокишнова Л.А., 87,
102
Новосадов Б.К., 47
Норко С.И., 92
Нурмонов С.Э., 93

О

Овешников Л.Н., 33
Овсянников Н.А., 77
Овчинников О.В., 85
Оганесян А.А., 84
Орехов А.С., 33
Орлов А.А., 43
Орлов М.Ю., 48
Орлов Ю.Д., 48, 52
Осипова Н.С., 87
Османова С.Н., 51
Островская Л.А., 42
Отамухамедова Г.К., 76

П

Павленко Р.Р., 103
Пайда И.А., 85
Паланкоев Т.А., 59, 71, 92,
98, 99
Пальмина Н.П., 100
Панкина Г.В., 93
Панкратьев Е.Ю., 106
Панов М.Н., 30
Парманов А.Б., 93
Пашалиев Б.Л., 48
Пашкевич С.Н., 85
Пебалк А.В., 99
Пен Шан, 31
Перченко С.В., 43
Петерс Г.С., 83
Пилипенко Е.Н., 39
Пирязев А.А., 74
Погонин В.И., 42
Подругина Т.А., 41, 42
Подъельникова Е.С., 66
Покочуева Е.В., 48
Политенкова Г.Г., 89
Полунин К.Е., 104
Полунина И.А., 104
Пономарева А.К., 93
Посвянский В.С., 28

Поташова Н.И., 62, 94
Приходченко Т.Р., 68
Прокофьев С.И., 94
Пронин Т.Н., 65
Проскурина Е.Ю., 75
Пчёлкин В.П., 94

Р

Рабенко Е.В., 95
Рабинович А.Б., 37
Радаева А.П., 78
Радченко А.Ш., 41, 42
Размыслов А.В., 39
Разуваев А.Г., 38
Разумов В.Ф., 46, 47, 67
Разумцев А.А., 95
Ракитин В.В., 67, 96
Ракша Е.В., 61, 90
Рахимов Т.Х., 49
Рахманбердиев Г.Р., 58
Рашидов Д., 84
Ребрикова А.Т., 29
Рзаев Ю.Р., 49
Рогова Д.А., 96
Рогозина А.А., 81
Родин В.М., 36, 96
Родионов А.И., 97
Родионов И.Д., 97
Родионова И.П., 97
Роенко А.В., 98
Ромазанова Д.А., 58, 98
Романов В.А., 36
Ростовщикова Т.Н., 32,
40, 49, 70
Роцупкина Д.А., 59, 92, 98
Рубцов Н.М., 41, 97
Руднева Е.Б., 97
Рузанкин С.Ф., 40
Рузимурадов О.Н., 50, 87,
90
Румянцев Б.М., 99
Рупасов С.И., 30
Русул Алабада, 80
Рухля Е.Г., 79
Рябов М.А., 80

С

Савоськин М.В., 61
Сагарадзе А.Д., 99
Садыкова О.Г., 88

Сажина Н.Н., 100
Сазонов А.А., 67
Сайидов У.Х., 57
Салганская М.В., 39
Сало В.А., 63
Салова А.В., 30
Саломатина Е.В., 44
Саматов С.Б., 76
Самофалова Т.В., 75
Самусев И.Г., 76, 88
Сангинов Е.А., 78
Санина Н.А., 68
Сарвадий С.Ю., 33, 67,
70, 71, 100, 105
Сахарутов Д.А., 33
Сахно С.В., 28
Сачкова Н.В., 34
Свалова А.И., 100
Свиридова Л.Н., 100
Седловец Д.М., 67
Седов И.В., 86
Седуш Н.Г., 34
Семенкин А.С., 87
Семенов А.Л., 36
Семенов В.Н., 75
Семенов С.А., 78
Семенова И.В., 30, 36, 96
Семенова М.Г., 100
Сеплярский Б.С., 41, 43
Сергеев В.О., 54
Сергеев Д.И., 77
Серёгина Е.А., 52
Сивенкова Е.В., 109
Сидоров О.И., 101
Силяков С.Л., 34
Синяшин О.Г., 66
Скитневская А.Д., 50
Скурлатов Ю.И., 109
Слежкин В.А., 76, 88
Смирнов А.А., 101
Смирнов В.Н., 46
Смирнов М.С., 85
Смирнов О.В., 30
Смирнова Л.А., 44
Смирнова Т.И., 47
Снатенкова Ю.М., 44
Соколов А.А., 54
Соколов М.А., 83
Соловьева С.Е., 32, 53
Спирёва Д.В., 101
Спирин М.Г., 67
Старчак Е.Е., 102

Стенин В.Ф., 100
Стенина Е.В., 100
Стецюра С.В., 40, 50, 54
Стищенко П.В., 100
Стовбун С.В., 64, 65, 89
Стодолина Е.П., 73
Столяров И.П., 51
Столярова Д.Ю., 83
Стрижак Е.А., 89
Сулейманова С.А., 51
Султанов Р.А., 102
Султанова А.А., 102
Султанова Э.Д., 32
Сухоруков Д.А., 101
Сычева М.Н., 80

Т

Табаров С.Х., 84
Тарасенко В.А., 38
Тарасов В.Ф., 59, 64
Тарханова И.Г., 49
Тверьянович А.С., 51, 95
Тверьянович Ю.С., 51, 95,
104
Тереза А.М., 46, 51
Терентьев А.В., 63, 102
Терзян А.М., 60
Терновая О.Н., 103
Тимофеева А.В., 58
Титов А.А., 82
Титов С.В., 75
Тихонов Г.В., 52
Тихонова О.Г., 72
Ткачёв Я.В., 103
Товбин Ю.К., 27, 37, 75
Товстун С.А., 52
Толиаутас С., 35
Торунова С.А., 73
Трахтенберг Л.И., 28, 35
Трегубова М.А., 65
Трофимов А.Б., 50
Трошин К.Я., 97
Трубина С.В., 52, 57, 110
Трунина В.М., 75
Туйчиев Ш., 84
Туровская М.К., 103
Туровский Н.А., 103
Туровцев В.В., 48, 52
Турсунбоев Ж., 50
Тухбатуллин А.А., 53

У

Уваров В.И., 80, 103
Уваров С.В., 103
Удалова О.В., 109
Уласевич С.А., 105
Ульянов А.В., 102, 104
Усачев С.В., 89
Утеньшиев А.Н., 61
Ушакова Т.М., 102

Ф

Фазлетдинов Т.Р., 95, 104
Фатыхова Г.А., 53
Федотов А.С., 80, 103
Федулова Ю.А., 94
Финкельштейн Е.Ш., 45,
98
Фирсин И.Д., 104
Флакина А.М., 73, 105
Флид В.Р., 53, 105
Фортов В.Е., 37

Х

Хаджиев С.Н., 58, 59, 71,
98
Хаитов М.Р., 58
Харитонов В.А., 71, 100,
105
Харитонова П.Г., 54
Харламов В.Ф., 54
Хатымов Р.В., 106
Хатымова Л.З., 54, 106
Хвостенко О.Г., 54, 107
Хомик С.В., 90
Хотина И.А., 80
Хренова М.Г., 55
Хрустин А.М., 108
Худайбергганов А.А., 91
Хусанов З., 87

Ц

Цветков Г.И., 97
Цеплин Е.Е., 54, 107
Цеплина С.Н., 54, 107
Цодиков М.В., 37, 56, 59,
72, 73, 80, 88, 92, 98,
103, 109
Цыбуля С.В., 68

Ч

Чайкин А.М., 38
Чайкина Ю.А., 55
Чащин И.С., 61
Чвалун С.Н., 33, 34, 83
Чепайкин Е.Г., 55
Червонная Н.А., 103
Черепанова Т.Т., 45
Чернавский П.А., 28, 93
Чернозатонский Л.А., 28
Чернявский Г.Г., 36
Чистяков А.В., 56, 72, 73,
91, 109
Чолач А.Р., 56
Чудакова М.В., 72, 107
Чуканов Н.В., 75
Чумакова Н.А., 27, 29, 91
Чучелкин И.В., 33, 104

Ш

Шадрин Г.К., 107, 108
Шадрин М.Г., 108
Шайлина Д.М., 85
Шамсиев Р.С., 53, 105
Шандрюк Г.А., 45, 98
Шарипов Г.Л., 53
Шарова М.В., 71
Шастин А.В., 65, 75
Шатилов А.А., 58
Швыдкий В.О., 109
Шелаев И.В., 82, 108
Шепелин А.В., 32
Шерматов Д.К., 90
Шибаетаева А.В., 42
Шилина М.И., 32, 109
Шилкин С.П., 39
Шилов Г.В., 65, 73, 105
Шилов И.Н., 101
Шиловский И.П., 58
Шипуло Е.В., 87
Ширяев А.А., 66, 104
Шкондина Н.И., 68
Шмакова Н.А., 83
Шмыглева Л.В., 78
Штамм Е.В., 109
Штиль А.А., 41
Шуб Б.Р., 33, 35, 67, 70,
71, 100, 105
Шубин А.А., 40
Шувалов В.А., 108

Шулятьев А.А., 59, 81
Шумова В.В., 37
Шумянецев А.В., 93
Шустов В.С., 103
Шутилов А.А., 56
Шушин А.И., 57

Щ

Щербина М.А., 61
Щукин П.В., 106

Э

Эзжеленко Д.И., 91, 109
Эллерт О.Г., 66
Эренбург С.Б., 52, 57, 110

Ю

Юнусов М.П., 57, 91
Юрова И.Ю., 69
Юсупова Дж., 85
Юхвид В.И., 34, 89

Я

Явсин Д.А., 49, 70
Яковлева Ю.А., 63
Якущенко И.К., 106
Ярмоленко О.В., 106
Ясина Л.Л., 59
Яхья Абсалан, 80

Отпечатано в ООО «АСТРА ПОЛИГРАФИЯ»
ул. Полярная 33Б
Тираж 400 экз.
Заказ 1019