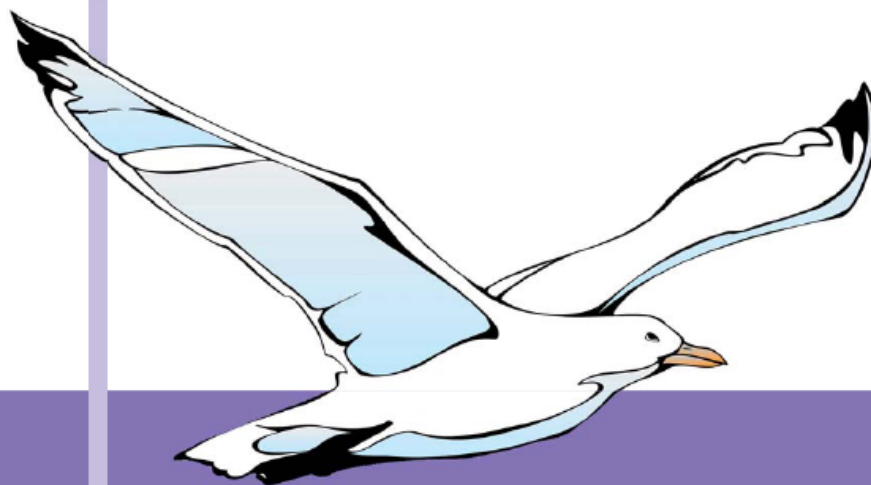


ТУАПСЕ 2017

# Современная химическая физика

XXIX Симпозиум



сборник  
аннотаций

17 - 28 сентября 2017 года  
Пансионат «Маяк», г. Туапсе

ISBN 978-5-85493-304-3

**Современная химическая физика**  
**XXIX Симпозиум**

ISBN 978-5-85493-304-3

# УВАЖАЕМЫЕ УЧАСТНИКИ XXIX СИМПОЗИУМА «СОВРЕМЕННАЯ ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»!

В двадцать девятый 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 XXIX 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 № 17-03-20360

# 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.  
чл.-корр. 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

---

17 СЕНТЯБРЯ, ВОСКРЕСЕНЬЕ

---

Заезд участников. Регистрация.

---

18 СЕНТЯБРЯ, ПОНЕДЕЛЬНИК

---

## Утренняя сессия

Ведущий: проф. Шуб Б.Р.

10.00 Открытие Симпозиума

10.30 **Цодиков Марк Вениаминович** «Особенности структуры и каталитической активности пористых мембранно-каталитических систем в процессах получения водородсодержащего газа»

11.10 **Васютинский Олег Святославович** «Двухфотонная фемтосекундная спектроскопия биологических молекул»

## Вечерняя сессия

Биохимическая физика

Ведущий: академик Бучаченко А.Л.

16.00 **Немухин Александр Владимирович** «Молекулярные механизмы формирования и разрушения хромофоров в цветных белках»

16.40 **Летута Ульяна Григорьевна** "Магниточувствительность бактерий *E. coli*"

16.55 **Хренова Мария Григорьевна** "Молекулярный механизм гидролиза антибиотиков металло- $\beta$ -лактамазами"

17.10 **Королев Дмитрий Владимирович** "Исследование эффективности различных способов аминирования магнитных наночастиц для медицинского применения"

17.25 **Костюкевич Юрий Иродионович** "Структурные исследования биомакромолекул методами масс-спектрометрии сверхвысокого разрешения"

17.40 **Никольский Виктор Михайлович** "Биоразлагаемые комплексоны. Влияние оптической изомерии на их кислотно-основные характеристики"

---

19 СЕНТЯБРЯ, ВТОРНИК

---

### Утренняя сессия

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии

Ведущий: проф. Кожушнер М.А.

9.00 **Трахтенберг Леонид Израйлевич** «Проводящие, оптические и сенсорные свойства бинарных наноструктурированных металлоксидных систем»

9.40 **Шушин Анатолий Иванович** "Кинетика распада возбужденного синглетного состояния в органических полупроводниках. Проявление миграции T-экситонов."

9.55 **Бричкин Сергей Борисович** "Фотоактивация люминесценции коллоидных квантовых точек и мерцание их флуоресценции"

10.10 **Лебедев Николай Геннадьевич** "Квантовая модель однодоменного магнитомягкого ферромагнетика"

10.25 Перерыв

10.35 **Трубина Светлана Владимировна** "Новый гибридный материал  $\text{Vi(III)@MIL-101}$  на основе мезопористого координационного полимера. Структура, свойства."

10.50 **Шмыглева Любовь Вячеславовна** "Влияние природы оксидного носителя рабочего электрода на свойства потенциометрических сенсоров на водород и монооксид углерода"

11.05 **Некрасов Виктор Михайлович** "Необычная региоселективность  $\text{C1-C70}(\text{CF}_3)_{10}$  в реакции Дильса—Альдера"

11.20 **Васильков Александр Юрьевич** "Гибридные материалы медицинского назначения: металло-паровой синтез, строение и свойства"

### Вечерняя сессия

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии

Ведущий: к.ф.-м.н. Кожевин В.М.

16.00 **Товбин Юрий Константинович** «Ограничения классической термодинамики»

16.40 **Эренбург Симон Борисович** "Диффузия и деформации в гетеросистемах со сверхрешетками GaN/AlN"

16.55 **Зайцева Елена Сергеевна** "Расчет поверхностного натяжения жидких и твердых чистых металлов и их сплавов"

17.10 **Маковийчук Мирослав Иванович** "Дефектно примесный фликкер-шумовой метод информационного анализа в микро- и нанотехнологии"

17.25 **Григорьева Татьяна Федоровна** "Механохимическое получение карбидов титана и гафния"

17.50 **Григорьева Татьяна Федоровна** "Механохимическое получение ультрадисперсных порошков Si, Ge, Cu, Ag"

---

20 СЕНТЯБРЯ, СРЕДА

---

### Утренняя сессия

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

1. **Абдрашитов Георгий Олегович** "Получение и каталитические свойства ферромагнитных биметаллических наночастиц на основе кобальта"

2. **Берестнева Юлия Васильевна** "Графеноподобные частицы из терморасширенного графита на основе тройного соинтеркалата нитрата графита"

3. **Бричкин Сергей Борисович** "Влияние фото- и термо-активации CdSe-ядер на люминесцентные свойства коллоидных квантовых точек CdSe@CdS"

4. **Вдовиченко Артём Юрьевич** "Особенности процесса формирования нанокмполитов поли-п-ксилилена и серебра"

5. **Волков Владимир Тимофеевич** "Большое положительное магнитосопротивление в модифицированном графене в поле до 0.5 Тесла"

6. **Гаджиев Олег Боярович** "Адсорбция бутен-2-аля на химически модифицированной поверхности кластера Pt<sub>25</sub>. Квантово-химическое исследование"

7. **Гак Владимир Юрьевич** "Влияние фотоактивации и толщины сульфидной оболочки на мерцание флюоресценции коллоидных квантовых точек"

8. **Голубь Александр Семенович** "Наноструктурированные гетерослоистые соединения дисульфида молибдена с аминопроизводными нафталина"

9. **Гребенщиков Юрий Борисович** "Новый метод расчета тонкостенных магнитных экранов на основе материала АМАГ-172"

10. **Гревцева Ирина Геннадьевна** "Фотофизические и фотохимические процессы гибридной ассоциации коллоидных квантовых точек Ag<sub>2</sub>S с молекулами органических красителей"

11. **Гревцева Ирина Геннадьевна** "Механизмы межмолекулярных взаимодействий, обеспечивающих образование гибридных ассоциатов коллоидных КТ Ag<sub>2</sub>S с молекулами МВ"

12. **Гришин Максим Вячеславович** "Физико-химические свойства покрытий образованных золотыми и никелевыми наночастицами"

13. **Гришин Максим Вячеславович** "Взаимодействие биметаллических наноструктурированных катализаторов с СО, О<sub>2</sub> и Н<sub>2</sub>"

14. **Гусева Дарья Геннадиевна** "Влияние режима спекания композитов Са-ZrO<sub>2</sub> - Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> на их механические свойства"



15. **Дохликова Надежда Владимировна** "Атомная и электронная структура кластеров Au<sub>x</sub>Ny"
16. **Завьялов Сергей Алексеевич** "Влияние полимерной матрицы на формирование и стабилизацию аномальных структур наночастиц в тонкопленочных нанокompозитах"
17. **Завьялов Сергей Алексеевич** "Влияние толщины и концентрации пленок полимерных нанокompозитов ППК-CdS на их оптические свойства и размер наночастиц "
18. **Завьялов Сергей Алексеевич** "Распределение по размерам полимерных глобул в пленках нанокompозитов ППК-CdS разной толщины в зависимости от концентрации наполнителя "
19. **Загайнов Игорь Валерьевич** "Электропроводящие свойства твердых растворов на основе диоксида церия"
20. **Зайцева Елена Сергеевна** "Время вакансионной релаксации плотности в каплях металлов"
21. **Звягин Андрей Ильич** "Нелинейные абсорбционные свойства водных растворов красителей"
22. **Звягин Андрей Ильич** "Термостимулированная люминесценция в коллоидных квантовых точках Ag<sub>2</sub>S"
23. **Ивичева Светлана Николаевна** "К структуре 3D-упорядоченных нанокompозитов на основе опаловых матриц. Малоугловое рассеяние."
24. **Ивичева Светлана Николаевна** "Получение трехмерных нанокompозитов на основе опаловых матриц различного функционального назначения при обработке спиртами в сверхкритических условиях"
25. **Карелин Александр Иосафович** "Спектры ИК НПВО и строение комплекса H<sup>+</sup>(DMCO)<sub>2</sub> в Нафине"
26. **Козлов Андрей Аркадьевич** "Сенсоры с высокой чувствительностью детектирования паров толуола на основе фотонных кристаллов"
27. **Козловский Александр Валерьевич** "Описание фотоэлектронных процессов на границе «полиэлектролит - полупроводниковая подложка» при фото- и электростимуляции адсорбции полиэлектролитов"
28. **Козловский Александр Валерьевич** "Описание процессов токопереноса на границе структур «органическое покрытие - полупроводниковая подложка», полученных при фотостимулированной адсорбции"
29. **Колчина Анастасия Сергеевна** "Структурные аспекты взаимодействия водорода со сплавами Pd-Ag и Pd-In-Ru"
30. **Конобеева Наталия Николаевна** "Влияние электрического поля на проводимость графеновых флейков с примесями"
31. **Конобеева Наталия Николаевна** "Влияние многоуровневых примесей на динамику двумерных предельно коротких оптических импульсов в германене "
32. **Куприянов Леонид Юрьевич** "Особенности проводимости фрактальных нанопленок на основе оксидных полупроводников"
33. **Леонова Лиана Юрьевна** "Влияние температуры на люминесцентные свойства гибридных ассоциатов молекул красителя тионина с коллоидными квантовыми точками Ag<sub>2</sub>S"

34. **Леонова Лиана Юрьевна** "Исследование спектральных свойств  $Cd_xZn_{1-x}S$  и  $CdS$ , выращенных на поверхности нанокристаллов диоксида титана"
35. **Прокофьев Сергей Ильич** "Тепловое поведение цепочки нановключений жидкого  $Pb$ , связанных одной дислокацией в  $Al$  матрице"
36. **Разумцев Александр Алексеевич** "Влияние стеклофазы  $V_2O_5 * GeO_2$  на свойства нанослоев  $AgI$ "
37. **Румянцев Борис Михайлович** "Фотопроцессы и спиновые магнитные эффекты в пленках полимерных композитах с рубреном и магнитными наночастицами: их взаимодействие с возбужденными состояниями"
38. **Рыжкина Ирина Сергеевна** "Самоорганизация и свойства водных дисперсных систем на основе(S)- и (R)-лизина в интервале низких концентраций и физиологически важных температур"
39. **Сарвадий Сергей Юрьевич** "Особенности взаимодействия  $CO$  и  $H_2$  на поверхности наночастиц золота, нанесенных на  $VOPO$  "
40. **Сергеева Светлана Юрьевна** "Разработка физико-химического предскрининга биоэффектов растворов биологически активных веществ низких концентраций"
41. **Трахтенберг Леонид Израйлевич** "Направленное движение частиц, генерируемое флуктуациями их размера"
42. **Уваров Валерий Иванович** "Разработка СВС мембраны для процесса парового риформинга диметилового эфира"
43. **Харитоновна Полина Геннадьевна** "Формирование пространственного и потенциального рельефа границы раздела "полупроводник - органическое покрытие" при структурировании органического слоя металлосодержащими наночастицами"
44. **Харитоновна Полина Геннадьевна** "Процессы самоорганизации металлических и металлосодержащих частиц в органической матрице, полученной при использовании различных технологических приемов"
45. **Шапочкина Ирина Викторовна** "Теория броуновских моторов со слабо флуктуирующими потенциалами "
46. **Юнусов Мирахмад Пулатович** "Синтез наноразмерных катализаторов оксида никеля в матрице пористого  $Al_2O_3$  методом молекулярного наслаивания"
47. **Баймуратова Гузалия Рафиковна** "Эффект наночастиц  $SiO_2$  на сопротивление межфазной границы нанокompозитный полимерный электролит/литиевый электрод"

## **Вечерняя сессия**

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии

Ведущий: проф. Трахтенберг Л.И.

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

16.30 **Датий Ксения Алексеевна** "Наноструктурированная полиметаллическая система Fe-Co-Ni"

16.45 **Вальнюкова Анастасия Сергеевна** "Синтез и некоторые свойства гидроксидов Ni-Cd"

17.00 **Харламов Владимир Федорович** "Охлаждение мелкодисперсных полупроводников постоянным и переменным электрическим током"

17.15 Перерыв

17.20 **Гатин Андрей Константинович** "Адсорбция водорода на наночастицах золота"

17.35 **Кирсанкин Андрей Александрович** "Взаимодействие водорода с единичными нанесенными наночастицами меди"

17.50 **Амиров Ильдар Искандерович** "Формирование наносетчатых, фторированных, углеродных наноструктур на поверхности кремния в двухстадийном процессе травления во фторсодержащей плазме"

18.05 **Харитонов Василий Анатольевич** "Взаимодействие нанесенных платиновых и борорганических наночастиц с газообразными реагентами"

---

## 21 СЕНТЯБРЯ, ЧЕТВЕРГ

---

### Утренняя сессия

Квантовая химия

Ведущий: проф. Немухин А.В.

9.00 **Дзябченко Александр Валентинович** "Модели эффективных зарядов для описания межмолекулярных взаимодействий"

9.40 **Туровцев Владимир Владимирович** "Задача внутреннего вращения в химической физике"

10.10 Перерыв

10.20 **Игнатов Станислав Константинович** "Глобальная оптимизация структуры кластеров и наночастиц платины комбинированным методом DFT/ReaxFF"

10.40 **Орлов Юрий Димитриевич** "Строение и свойства сопряженных органических радикалов"

10.55 **Завелев Денис Ефимович** "Квантово-химическое изучение деоксигенации сложных эфиров на Pt Sn катализаторах"

### Вечерняя сессия

Фотохимия и радиационная химия, элементарные процессы, химическая радиоспектроскопия

Ведущий: проф. Гордон Е.Б.

16.00 **Будыка Михаил Федорович** "Фотоизомеризация двойной связи как действующее начало молекулярных устройств: роторов, автомобилей, переключателей, логических вентилях"

16.15 **Болотов Василий Александрович** "О природе СВЧ-активированного состояния гиббсита "

16.30 **Дмитриевский Александр Александрович** "Количественная оценка объемов метастабильных фаз кремния Si-II, Si-XII, Si-III и a-Si, формируемых при индентировании исходных и предварительно облученных монокристаллов"

16.45 **Иванов Анатолий Иванович** "Нарушение симметрии в возбужденных квадрупольных молекулах "

17.00 Перерыв

17.10 **Феськов Сергей Владимирович** "Математическая модель многостадийного фотоиндуцированного переноса электрона в недебаевском полярном растворителе"

17.25 **Тихонов Геннадий Викторович** "Жидкие активные среды на Yb<sup>3+</sup> для лазеров с диодной накачкой"

17.40 **Хатымов Руستم Владиславович** "Электронное сродство изомерных молекул полициклических ароматических углеводородов и автонеутрализационное время жизни молекулярных отрицательных ионов"

17.55 **Поздняков Иван Павлович** "Стимулированная триоксалатным комплексом железа и фульвокислотой фотодеградация гербицидов в водных растворах"

---

22 СЕНТЯБРЯ, ПЯТНИЦА

---

### Утренняя сессия

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

1. **Летута Сергей Николаевич** "Динамика изменения концентрации кислорода в биологических тканях при импульсно-периодическом возбуждении фотосенсибилизаторов"
2. **Проскураков Иван Игоревич** "Влияние магнитного поля на рост фототрофных пурпурных бактерий"
3. **Сажина Наталья Николаевна** "Ингибирующее действие некоторых биоантиоксидантов и их смесей в разных модельных системах"
4. **Столяров Игорь Павлович** "Противоопухолевая активность аллильных комплексов палладия с гетероароматическими лигандами in vivo "
5. **Ткачев Ярослав Владимирович** "Конформационный анализ нормальных и изомеризованных амилоидных пептидов Abeta1-42 для определения потенциальных интерфейсов связывания с белками-мишенями"
6. **Чумакова Наталья Анатольевна** "ЭПР диагностика полимерных структур, содержащих биологически активные вещества"

7. **Андреев Сергей Михайлович** "Биораспределение и фармакокинетика фуллерена C<sub>60</sub>, введенного в форме водной дисперсии dnC<sub>60</sub>"
8. **Максименко Ольга Олеговна** "Противоионы как способ регулирования параметров ПЛГА-НЧ с доксорубицином"
9. **Бузин Михаил Игоревич** "Силоксан(бутиленоксид)уретановые блок-сополимеры. Синтез в массе и свойства"
10. **Голубев Евгений Константинович** "Структура ориентированных материалов, полученных твердофазным формованием реакторных порошков СВМПЭ "
11. **Демина Варвара Анатольевна** "Композиционные материалы на основе полилактида и фосфатов кальция"
12. **Загоскин Юрий Дмитриевич** "Гидрогели на основе биоразлагаемого сополимера молочной кислоты и этиленгликоля"
13. **Калинина Ирина Георгиевна** "Экспресс метод оценки грибостойкости полимерных материалов"
14. **Кузнецов Никита Михайлович** "Электрореологические жидкости наполненные нанотрубками галлуазита"
15. **Роечко Алексей Валерьевич** "Кросс-метатезис между производными полинорборнена и полициклооктена: влияние боковых заместителей"
16. **Скачкова Вера Константиновна** "Поликонденсация силикатов в присутствии кластерных анионов бора [B<sub>10</sub>Cl<sub>10</sub>]<sup>2-</sup>, [B<sub>10</sub>H<sub>10</sub>]<sup>2-</sup>, [B<sub>12</sub>H<sub>12</sub>]<sup>2-</sup>"
17. **Старчак Елена Евгеньевна** "Реакторные смеси сверхвысокомолекулярного полиэтилена с сополимерами этилен/гексен-1, полученные на гомогенном металлоценовом катализаторе "
18. **Долин Сергей Петрович** "Применение методов квантовой химии (КХ) в микротехории структурных фазовых переходов (СФП) для H-связанных сегнетоэлектриков (СЭ) и родственных систем"
19. **Логинова Анастасия Сергеевна** "Спектральные, структурные и электронные свойства композитных сополимеров на основе полититаноксида с наночастицами золота. Квантовохимическое исследование"
20. **Маматова Алина Артуровна** "Изучение различных конформаций молекул казеина методами квантовой химии "
21. **Наумов Владимир Сергеевич** "Растворение и ассоциация биологических полимеров в водных средах различной кислотности. Молекулярно-динамическое исследование"
22. **Панкратьев Евгений Юрьевич** "Квантово-химический расчёт поляризуемости термодинамически наиболее стабильных изомеров фуллеренов C<sub>20</sub> - C<sub>720</sub>"
23. **Разуваев Алексей Григорьевич** "Термодинамика водных кластеров с различными типами сетки водородных связей"
24. **Тулибаева Галия Зайнетдиновна** "Квантово-химическое моделирование строения сольватных комплексов LiBF<sub>4</sub> в этиленкарбонате с учетом данных ЯМР спектроскопии высокого разрешения"

25. **Ярмоленко Ольга Викторовна** "Квантово-химическое моделирование изменения структур органических катодных материалов при допировании литием"
26. **Зленко Дмитрий Владимирович** "Раскручивание нанофибрилл лимитирует скорость нитрования целлюлозы"
27. **Зленко Дмитрий Владимирович** "Молекулярная структура растворов тартрата натрия"
28. **Веденкин Александр Сергеевич** Влияние производного тиазолидин-2,4-диона на мембрану клетки и синтез эргостерола патогенного гриба *Candida albicans*
29. **Веденкин Александр Сергеевич** Профилактическое защитное действие азотнокислого лантана при бактериальных инфекциях
30. **Веденкин Александр Сергеевич** "Роль структурных напряжений при термодеструкции нитроцеллюлозы"
31. **Веденкин Александр Сергеевич** "Кальциевая соль N-(5-гидроксиникотиноил)-L-глутаминовой кислоты изменяет реакцию пирамидных нейронов CA1 области гиппокампа при ортодромной стимуляции в срезах гиппокампа крыс"
32. **Никольский Сергей Николаевич** "Установка ИХФ РАН для физико-химического модифицирования товарной целлюлозы"

### **Вечерняя сессия**

Нанохимия, нанофизика и нанотехнологии, высокомолекулярные соединения

Ведущий: член-корр. Озерин А.Н.

16.00 **Стовбун Сергей Витальевич** "Суперспирализация: супрамолекулярные модели, эволюция, порох"

16.30 **Никольский Сергей Николаевич** "Целлюлозно-бумажная промышленность России: современное состояние и перспективы развития"

17.00 **Куркин Тихон Сергеевич** "Полимерные композиционные материалы на основе термоотверждаемых эпоксидных связующих, модифицированных алмазосодержащими наполнителями"

17.15 Перерыв

17.20 **Григорьева Татьяна Федоровна** "Механокомпозиты биологически активных органических кислот на основе лекарственного полимера"

17.35 **Каюмов Руслан Рифатович** "Перенос катионов щелочных металлов в аprotонных полимерных электролитах на основе Нафтона"

17.50 **Сулейманова Самира Аббас** "Влияние ПАВ на агрегативную устойчивость нефти по данным методов динамического рассеяния света и электронных спектров поглощения в ультрафиолетовой и видимой областях"

18.05 **Мясоедова Вера Васильевна** "Особенности свойств композитов на основе смесей производных целлюлозы, термопластов и компатибилизаторов"

---

23 СЕНТЯБРЯ, СУББОТА

---

### Утренняя сессия

Горение и взрыв

9.00 **Медведев Сергей Павлович** "Экспериментальное моделирование крупномасштабных взрывов полугораниченных водородно-воздушных облаков"

9.40 **Селеткова Анастасия Васильевна** "Влияние  $Fe(CO)_5$  на воспламенение водородно-кислородных смесей в отраженных ударных волнах"

9.55 **Михалкин Виктор Николаевич** "Распространение газовой детонации при локальном воздействии"

10.10 **Голубев Владимир Константинович** "Физико-химические свойства, механизмы разложения и взрывное действие ряда разработанных в ЛМУ взрывчатых веществ"

10.25 **Черепанов Алексей Александрович** "Влияние длины парафиновой части ионных жидкостей на основе пропаргил – имидазола на параметры самовоспламенения в смеси с окислителем"

10.40 Перерыв

10.50 **Черепанова Тахмина Тахировна** "Особенности течения при детонации водородовоздушной смеси, ограниченной тонкостенной быстроразрушающейся оболочкой"

11.05 **Тереза Анатолий Михайлович** "Образование наночастиц железа, инкапсулированных в углеродную оболочку, в ударных волнах"

11.20 **Назарова Нина Владимировна** "Воспламенение смесей ацетона с кислородом в ударных волнах"

11.35 **Кочетков Роман Александрович** "Природа концентрационных пределов распространения волны горения в порошковой и гранулированной смеси  $Ti+C+xAl_2O_3$ "

11.50 **Кочетков Роман Александрович** "СВ синтез карбида титана с никелевой связкой из гранулированной шихты насыпной плотности"

12.05 **Мееров Дмитрий Борисович** "Горение модельных составов на основе бора и его соединений с перхлоратом аммония"

## **Вечерняя сессия**

Кинетика и динамика химических реакций, химическая радиоспектроскопия

Ведущий: проф. Плахутин Б.Н.

16.00 **Чумакова Наталья Анатольевна** "Возможности спектроскопии ЭПР X-диапазона в определении характеристик ориентационной упорядоченности, а также вращательной и трансляционной подвижности молекул."

16.30 **Киселёв Владимир Дмитриевич** "Кинетика и термохимия активированной N=N связи в реакциях циклоприсоединения."

16.45 **Коптелов Александр Александрович** "Оценка индукционного периода теплового взрыва энергетических материалов по данным термического анализа"

17.00 **Корнилов Дмитрий Анатольевич** "Сольвофобное ускорение реакции Дильса-Альдера между 9,10-дигидроксиметилантраценом и N-этилмалеинимидом"

17.15 Перерыв

17.30 **Салин Алексей Валерьевич** "Кориолисово взаимодействие и вторичные кинетические изотопные эффекты в реакции третичных фосфинов с активированными алкенами"

17.45 **Капралова Галина Александровна** "Кинетика газофазной реакции метанола с трихлоридом бора"

18.00 **Чайкина Юлия Александровна** "Критическое состояние CO<sub>2</sub> как пример стохастической наносборки."

18.15 **Чернавский Петр Александрович** "Топохимические реакции наночастиц оксидов железа в катализаторах синтеза Фишера-Тропша."

18.30 **Айбуш Арсений Валерьевич** "Фемтосекундная КАРС микроспектроскопия для изучения биологических объектов"

---

24 СЕНТЯБРЯ, ВОСКРЕСЕНЬЕ

---

## **Утренняя сессия**

10.00 Стендовая сессия № 3 (горение и взрыв, кинетика и динамика химических реакций, химическая физика поверхности)

1. **Голубев Владимир Константинович** "Молекулярные свойства и первичные механизмы разложения взрывчатых перхлоратов тетразолатоамминокобальта(III)"

2. **Медведев Сергей Павлович** "Численное моделирование образования частиц сажи в условиях камеры сгорания дизеля: влияние добавок H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>"



3. **Осипов Александр Леонидович** "Методы вычисления концентрационных пределов"
4. **Тверьянович Юрий Станиславович** "Термическое и фотолитическое разложение перхлоратов тетразолат-амминатов кобальта(III)"
5. **Аникин Олег Викторович** "Влияние гидростатического давления, температуры и среды на протекание реакции  $[2\pi+2\sigma+2\sigma]$ -циклоприсоединения квадрициклана с 4-фенил-1,2,4-триазаолин-3,5-дионом"
6. **Аникин Олег Викторович** "Кинетика и термохимия реакции  $[2\pi+2\sigma+2\sigma]$ -циклоприсоединения между квадрицикланом и тетрацианоэтиленом"
7. **Бердинский Виталий Львович** "Спинзависимый квантовый эффект Зенона в радикальных триадах."
8. **Варфоломеева Вера Васильевна** "Межмолекулярные водородные связи в реакции алкоголиза хлорангидридов карбоновых кислот алифатическими спиртами"
9. **Дубовицкий Владимир Абрамович** "Оптимальное управление замкнутым периодическим реактором"
10. **Захаров Виктор Владимирович** "Изучение термического разложения 2-(динитрометил)-1,3-диазаацетопентана методами ДСК и ТГ"
11. **Зюзин Игорь Николаевич** "Стандартные энтальпии образования N-(2,2-бис(метокси-NNO-азокси)этил)пиразола, его 3- и 4-нитропроизводных"
12. **Казак Владислав Олегович** "Влияние калия на процесс активации Fe/сибунит катализаторов синтеза Фишера-Тропша"
13. **Киселёв Владимир Дмитриевич** "Лёгкое протекание запрещённой правилами Вудворда-Хоффмана термической реакции  $[2p+2p]$ -циклоприсоединения 4-фенил-1,2,4-триазаолин-3,5-диола с адамантилиден-адамантаном"
14. **Корнилов Дмитрий Анатольевич** "Влияние гидростатического давления, температуры и среды на скорость реакции Дильса-Альдера между 9,10-дигидроксиметилантраценом и малеиновым ангидридом"
15. **Коробов Александр Исаакович** "Линейные зависимости скейлинговых характеристик двумерных разбиений Пуассона-Вороного на квадратных решетках"
16. **Куртикян Тигран Степанович** "Шести-координационные нитрокомплексы Co(II)-порфиринов с транс диметилсульфоксидным лигандом"
17. **Панкина Галина Викторовна** "Особенности поведения Fe/Сагт и FeCu/Сагт катализаторов при активации монооксидом углерода и синтез-газом."
18. **Ульянов Алексей Владимирович** "Масс-спектрометрическое исследование влияния внешних факторов на разложение НДМГ на поверхности шунгитового материала"
19. **Звягина Ольга Владимировна** "Зависимость морфологии поверхности пленок твердых растворов системы CdS-ZnS от концентрации ионов  $Zn^{2+}$ "
20. **Карпушин Александр Александрович** "Сдвиг зон на гетерогранице полупроводниковых соединений АЗБ5"

21. **Михалева Мария Геннадьевна** "Прямой метод контроля качества поверхности мелованных видов бумаги "
22. **Простнев Александр Сергеевич** "О притяжении вакансий на поверхности Cu(111)"
23. **Свиридова Лиана Николаевна** "Адсорбционные характеристики кукурбит[8]урилы на межфазной границе электрод/раствор "
24. **Штамм Елена Валентиновна** "Кинетические особенности трансформации опасных химических веществ в природных водах их формы и пути миграции"
25. **Ковалев Иван Дмитриевич** "Высокотемпературная рентгенография карбида бора: исследование изменений структурных характеристик"
26. **Кислов Владимир Михайлович** "Конверсия пиролизных смол, образующихся при сверхадиабатической газификации древесины, в горючий газ"
27. **Насибулов Егор Андреевич** "Теоретическое описание импульсной Оверхаузеровой ДПЯ"

### **Вечерняя сессия**

Гомогенный и гетерогенный катализ

Ведущий: проф. Корчак В.Н.

16.00 **Флид Виталий Рафаилович** "О природе парамагнитных комплексов никеля в каталитических реакциях формирования и разрыва С-С-связи"

16.20 **Шестаков Александр Федорович** "Теоретическое изучение механизма восстановления малых молекул с кратными связями полиядерными комплексами молибдена"

16.40 **Гаврилов Константин Николаевич** "Асимметрический металлокатализ с участием бисдиамидофосфитов"

16.55 **Юнусов Мирахмат Пулатович** "Влияние способа формирования пористой структуры носителей на активность катализаторов нефтегазопереработки"

---

25 СЕНТЯБРЯ, ПОНЕДЕЛЬНИК

---

### **Утренняя сессия**

Гомогенный и гетерогенный катализ

Ведущий: проф. Цодиков М.В.

9.00 **Ростовщикова Татьяна Николаевна** "Наноструктурированные катализаторы, полученные лазерным электродиспергированием, в окислении CO "

9.40 **Корчак Владимир Николаевич** "Окислительное десульфирование как метод сверхтонкой очистки моторных топлив"

10.00 Перерыв

10.10 **Столяров Игорь Павлович** "Новые каталитические реакции гетероядерных комплексов палладия и платины"

10.25 **Чистяков Андрей Валерьевич** "Преобразование сверхкритических этанола и изопропанола в бутанол-1 и пентанол-2 в присутствии гетерогенных катализаторов"

10.40 **Константинов Григорий Игоревич** "Получение водородсодержащего газа путем воздействия микроволнового излучения на тяжелые нефтяные остатки"

### **Вечерняя сессия**

Химическая физика поверхности

Ведущий: проф. Корчак В.Н.

16.00 **Далидчик Федор Иванович** "Многорезонансные туннельные и оптооттуннельные электронные переходы"

16.40 **Кожушнер Мортко Аврумович** "Взаимодействие заряда с металлом"

17.00 **Гудков Максим Владимирович** "Аэрогели на основе восстановленного оксида графена"

17.15 **Тухбатуллин Адис Анисович** "Сонолиз суспензий кристаллов соединений лантанидов в углеводородах"

---

## 26 СЕНТЯБРЯ, ВТОРНИК

---

### **Утренняя сессия**

10.00 Стендовая сессия № 4 (гомогенный и гетерогенный катализ, элементарные процессы, фотохимия и радиационная химия, химическая радиоспектроскопия)

1. **Волкова Нина Николаевна** "Изменение скорости термической деструкции поликарбонатных пленок в присутствии нанопроволок платины и серебра"

2. **Гаврилов Владислав Константинович** "Новый P\*,P\*-бидентатный диамидофосфит на основе 1,8-октандиола в Pd-катализируемых асимметрических реакциях"

3. **Жарова Полина Александровна** "Переработка растительных масел в алканы и линейные  $\alpha$ -олефины в присутствии оригинального Pt-Sn/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> катализатора"

4. **Жеглов Сергей Викторович** "Каталитические системы на основе хиральных лигандов фосфитной природы с фрагментом (R,R)-TADDOL"

5. **Коробов Александр Исаакович** "Основные режимы решеточной модели обратимого изменения формы островка нанесенного катализатора в условиях химической реакции"

6. **Либерман Елена Юрьевна** "Низкотемпературное окисление монооксида углерода на Pd-Ag/CeO<sub>2</sub>"
7. **Махаев Виктор Дмитриевич** "Новые каталитические системы олигомеризации этилена на основе комплексов никеля"
8. **Насуллаев Хикматулло Абдулазизович** "Применения не традиционного сырья в процессах нефтепереработки"
9. **Николаев Сергей Александрович** "Синергизм каталитического действия Au-Cu, Au-Ag и Au-Zr композитов в прямой конверсии этанола в линейные альфа-спирты"
10. **Новиков Иван Михайлович** "Диамидофосфитные лиганды в Pd-катализируемых ассиметрических реакциях"
11. **Свиридова Лиана Николаевна** "Механизм окисления 2,3,5,6 тетра-метил-пиразин-ди-N-оксида - медиатора электрокаталитического окисления изопропанола на электродах из стеклоуглерода и одностенных углеродных нанотрубок"
12. **Чудакова Мария Владимировна** "Cu-Co катализаторы превращения синтез-газа в спирты C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>"
13. **Ширяев Алексей Александрович** "Новый P, P, P-тридентатный фосфинобисфосфорамидит на основе (Ra)-BINOL и 2-(дифенилфосфино)этиламина"
14. **Штерцер Наталья Владимировна** "Особенности формирования и восстановительной активации оксидных Cu-содержащих соединений со структурой шпинели"
15. **Куверова Вероника Владимировна** "Диссоциативная рекомбинация медленных электронов и молекулярных ионов азота"
16. **Голубков Геннадий Валентинович** "Процессы тушения орбитально вырожденных ридберговских частиц на молекулах кислорода"
17. **Калинин Александр Петрович** "Спектральные особенности излучения метано-кислородных пламён в условиях проникновения через препятствия. Возможности метода 4D спектроскопии "
18. **Куверова Вероника Владимировна** "Потенциальные кривые синглетных ридберговских и диссоциативных состояний молекулы N<sub>2</sub>"
19. **Куверова Вероника Владимировна** "Низкотемпературные реакции обмена с участием O, N, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> и ридберговских частиц в орбитально вырожденных состояниях"
20. **Малышев Николай Семенович** "Сечения многофотонной резонансной диссоциации молекулы NO"
21. **Родионов Игорь Дмитриевич** "Узкоугольный гиперспектрометр (угол зрения 3,50) видимого и ближнего инфракрасного диапазона"
22. **Родионов Алексей Игоревич** "Использование ультрафиолетовых и гиперспектральных сенсоров для изучения процессов горения и взрыва"
23. **Терентьев Алексей Владимирович** "Специфическая адсорбция одно- и многоатомных спиртов на графитированной термической саже"

24. **Хатымов Рустем Владиславович** "Особенности диссоциативного присоединения низкоэнергетических электронов молекулами фруктозы и глюкозы"
25. **Втюрина Дарья Николаевна** "Широкополосная ИК-фотолюминесценция легированного висмутом иодида  $TlCdI_3$ "
26. **Гавришова Татьяна Николаевна** "Синтез и фотохимические свойства бифотохромной диады на основе 1-(хинолил-2)-2-(пиренил-1)этилена"
27. **Кирюхин Дмитрий Павлович** "Радиационно-химический синтез теломеров тетрафторэтилена в хлорсиланах и их применение"
28. **Ли Виталий Моисеевич** "Фотохимические и люминесцентные свойства 1-пиренил- и 9-фенантрин-хинолинэтиленов в нейтральной и протонированной формах"
29. **Поташова Наталья Игоревна** "Реакции фотоизомеризации и фотоциклоприсоединения в бис-стирилбензохинолиновой диаде с 2,3-нафтиленовым мостиком"
30. **Румянцев Борис Михайлович** "Парамагнетизм полиимидов на основе парафенилендиамина, участие радикалов в процессах фотогенерации носителей тока"
31. **Шаповалова Оксана Вячеславовна** "Окисление метана и этилена, инициируемое продуктами богатого пламени метана и водорода"
32. **Шиянова Ксения Алексеевна** "Исследование влияния Ni-содержащего катализатора на матричную конверсию метана"
33. **Маслов Дмитрий Александрович** "Влияние Fe (III), Bi(III), Pb(II) –ионов на фотохимические свойства  $TiO_2 / F:SnO_2$  пленок, полученных из алкоксида титана"
34. **Родин Богдан Александрович** "Конверсия спиновой намагниченности в долгоживущие спиновые состояния в многоспиновых системах"
35. **Паланков Тимур Ахметович** "Селективная каталитическая деоксигенация ацетона в углеводородной среде на цеолитных катализаторах"
36. **Рыжикова Александра Игоревна** "Свойства железосодержащих композиционных материалов на основе полимера, проявляющих активность в реакции гидрирования CO"
37. **Антонов Дмитрий Олегович** "Особенности превращения органических субстратов в гибридном мембранно-каталитическом реакторе"
38. **Дементьев Константин Игоревич** "Влияние состава цеолитного катализатора на распределение продуктов каталитической деполимеризации полистирола в углеводородной среде"
39. **Дементьева Оксана Сергеевна** "Изменение маршрутов гидрирования CO в синтезе Фишера-Тропша путем промотирования наноразмерных железосодержащих систем"
40. **Вульпе Алена Викторовна** "Свойства наноразмерных железосодержащих промотированных суспензий в синтезе Фишера-Тропша"
41. **Арапова Ольга Владимировна** "Углекислотный риформинг лигнина в присутствии наноразмерных катализаторов при стимулировании микроволновым излучением"

42. **Зайцева Наталья Николаевна** "Кинетические особенности трансформации опасных химических веществ в природных водах их формы и пути миграции"

43. **Зайцева Наталья Николаевна** "Роль металлов переменной валентности в окислительно-восстановительных и свободно-радикальных процессах, протекающих в природных водах"

---

27 СЕНТЯБРЯ, СРЕДА

---

12.00 Закрытие Симпозиума

---

28 СЕНТЯБРЯ, ЧЕТВЕРГ

---

Отъезд участников

# Лекции

## Многорезонансные туннельные и оптооттуннельные электронные переходы

*Балашов Е.М., Далидчик Ф.И., Ковалевский С.А.*  
ИХФ РАН, город Москва

Теория бирезонансноготуннелирования обобщена на многорезонансные переходы. В том числе, оптооттуннельные, которые могут быть обнаружены при комнатных температурах по схеме парамагнитного резонанса молекул полиоксометаллатов.

## Модели эффективных зарядов для описания взаимодействий молекул и заряженных молекулярных частиц

*Дзябченко А.В.*<sup>1,2</sup>

1. ГНЦ РФ НИФХИ им. Л.Я.Карпова, г. Москва
2. Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, г. Москва

Представлен обзор работ автора по развитию и применению метода и программы FitMER для получения моделей эффективных зарядов в результате аппроксимации квантовомеханического МЭП аналитическим потенциалом точечных зарядов. Существенной стороной этих моделей является то, что они включают заряды вспомогательных центров, координаты  $x_i$ ,  $y_i$ ,  $z_i$  которых оптимизированы в пространстве наряду с зарядами  $q_i$ . Представлен новый вариант FitMER, расширенный для применения к молекулярным ионам и ион-радикалам.

## Экспериментальное моделирование крупномасштабных взрывов полуограниченных водородно-воздушных облаков

*Медведев С.П.*<sup>1</sup>, *Петухов В.А.*<sup>2</sup>, *Хомик С.В.*<sup>1</sup>

<sup>1</sup> ИХФ РАН, Москва

<sup>2</sup> ОИВТ РАН, Москва

Приведен обзор современных методов моделирования крупномасштабных взрывов полуограниченных водородно-воздушных облаков и подробно рассмотрена схема экспериментов, в которых перед зажиганием смесь водород – воздух заполняет тонкостенную резиновую оболочку большого объема. Показано, что данная методика позволяет определить параметры ударно-волнового действия газового взрыва в хорошо контролируемых условиях и предложить способы его ослабления.

## **Молекулярные механизмы формирования и разрушения хромофоров в цветных белках**

*Немухин А.В.<sup>1,2</sup>, Григоренко Б.Л.<sup>1,2</sup>, Московский А.А.<sup>1,2</sup>, Луцкекина С.В.<sup>2</sup>*

1. Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва
2. ИБХФ РАН, Москва

Обсуждаются результаты моделирования молекулярных механизмов формирования хромофорной группы из природных аминокислотных остатков в белках семейства зеленого флуоресцентного белка, а также процессов разрушения хромофора при фотовозбуждении. Для расчетов энергетических профилей соответствующих химических реакций используются методы квантовой механики/молекулярной механики.

## **Целлюлозно-бумажная промышленность России: современное состояние и перспективы развития**

*Ковалева К.И.<sup>1</sup>, Политенкова Г.Г.<sup>1</sup>, Горшков В.В.<sup>2</sup>, Никольский С.Н.<sup>1</sup>,  
Стовбун С.В.<sup>1</sup>*

1. Институт химической физики им. Н. Н. Семенова РАН, г. Москва
2. ООО «НПО АСУ ТП», г. Лобня МО

В работе выполнен анализ текущего состояния целлюлозно-бумажного производства в РФ и странах СНГ, представлены основные изготовители продукции и перспективы развития процессов глубокой химической переработки растительного сырья.

## **Наноструктурированные катализаторы, полученные лазерным электродиспергированием, в окислении СО**

*Ростовщикова Т.Н.<sup>1</sup>, Локтева Е.С.<sup>1</sup>, Кожевин В.М.<sup>2</sup>, Гуревич С.А.<sup>2</sup>*

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

На примере окисления СО кислородом анализируются особенности строения и каталитического поведения моно- и биметаллических Pt, Pd, AuNi катализаторов с низким содержанием металлов, полученных осаждением наночастиц на Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> методом лазерного электродиспергирования.



## **Суперспирализация: супрамолекулярные модели, предбиологическая эволюция, порох.**

*Стовбун С.В.*  
ИХФ РАН, Москва

В низкоконцентрированных растворах хиральных соединений исследовано спонтанное образование и свойства супрамолекулярных суперспирализованных квазиодномерных конструкций (струн). Установлено, что суперспирализация выступает как физический механизм проявления молекулярной хиральности на макроскопическом масштабе. На моделях струн исследованы процессы формирования гомохирального мира в рацемической и гетерохиральной среде. Сделано предположение о суперспирализации, как физическом инварианте, связывающем химическую и биологическую стадию эволюции. Установлена роль суперспирализации целлюлозы как хирального биополимера в процессах ее нитрования и горения пороха.

## **Ограничения классической термодинамики**

*Товбин Ю.К.*  
ГНЦ РФ НИФХИ им. Л.Я.Карпова, Москва

Разработки статистической механики для равновесных и неравновесных процессов позволили сформулировать ограничения классической термодинамики по пространственным масштабам и временным интервалам. Эти ограничения отражают учет: различий в характерных временах релаксации при переносе импульса, энергии и массы в разных агрегатных состояниях изучаемых систем; и достижения статистической механики, позволившие получить критерии: на размеры минимальных областей, в которых применима термодинамика, и формирования новых фаз, а также критерии на реализацию локального равновесия.

## **Проводящие, оптические и сенсорные свойства бинарных наноструктурированных металлоксидных систем**

<sup>1</sup>Иким М.И., <sup>1</sup>Боднева В.Л., <sup>2</sup>Бельшева Т.В., <sup>2</sup>Герасимов Г.Н., <sup>2</sup>Громов В.Ф.,  
<sup>2</sup>Спиридонова Е.Ю., <sup>3</sup>Астапенко В.А., <sup>3</sup>Сахно С.В., <sup>1</sup>Кожушнер М.А., <sup>1</sup>  
*Посвянский В.С., <sup>1,2,3</sup>Трахтенберг Л.И.*

<sup>1</sup>ИХФ РАН, Москва

<sup>2</sup>Нифхи им. Л. Я. Карпова, Москва

<sup>3</sup>МФТИ (ГУ), Долгопрудный

Развита теория сенсорного отклика на газы восстановители в наноструктурированных полупроводниковых оксидах. С использованием разработанной ранее модели, описывающей распределение электронов

проводимости в полупроводниковой наночастице, построена кинетическая схема, неплохо описывающая экспериментальные данные. Также представлены экспериментальные данные и рассчитано сечение поглощения фотонов полупроводниковыми наночастицами в инфракрасном диапазоне.

### **Задача внутреннего вращения в химической физике**

*Туровцев В.В.<sup>1,2</sup>, Каплунов И.А.<sup>1</sup>, Орлов Ю.Д.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> ТвГУ, Тверь,

<sup>2</sup> ТвГМУ, Тверь

В работе найдено аналитическое выражение для плотности вероятности торсионных состояний, соотношения для вероятностей переходов и интенсивностей, предложена мера локализации/делокализации состояний в потенциальных ямах и обобщение вращательного числа симметрии на задачу асимметричного внутреннего вращения.

### **Особенности структуры и каталитической активности пористых мембранно-каталитических систем в процессах получения водородсодержащего газа.**

*Цодиков М.В.*

ИНХС РАН, Москва

В работе представлены результаты направленного получения гибридных мембранно-каталитических систем, изучения их строения и каталитической активности в процессах получения водородсодержащего газа и ультрачистого водорода путем риформинга метана, продуктов ферментации, дизельной фракции и диметилового эфира.

### **Возможности спектроскопии ЭПР X-диапазона в определении характеристик ориентационной упорядоченности, а также вращательной и трансляционной подвижности молекул.**

*Чумакова Н.А., Воробьев А.Х.*

МГУ, Москва

На основании численного анализа спектров ЭПР нитроксильных радикалов различного строения в структурированных средах (жидких кристаллах, полимерах, полимерно-жидкокристаллических композициях, ионных жидкостях, на поверхности оксида графита) определены ориентационные функции распределения, анизотропия и механизм вращательной подвижности, а также коэффициенты трансляционной диффузии парамагнитных молекул.

# Устные доклады

## **Фемтосекундная КАРС микроспектроскопия для изучения биологических объектов.**

*Айбуш А.В., Гостев Ф.Е., Титов А.А., Надточенко В.А.*  
ИХФ РАН, Москва

В работе продемонстрировано использование фемтосекундных импульсов для рамановской микроспектроскопии. Показаны преимущества, которые дает данный подход для исследования сложных биологических объектов.

## **Самоформирование наносетчатых фторуглеродных наноструктур на поверхности кремния в двухстадийном процессе травления в фторсодержащей плазме**

*Амиров И.И., Изюмов М.О., Мазалецкий Л.А.*  
ЯФ ФТИАН РАН, г. Ярославль

Проведены исследования условий самоформирования наносетчатых фторуглеродных структур (НСФУС) на поверхности Si при двухстадийной обработке поверхности в плазме  $C_4F_8/Ar$  и плазме  $SF_6$ . При определенных параметрах проведения процесса на поверхности образуется НСФУС с толщиной сетки  $\sim 10$  нм и размерами ячейки  $\sim 50-100$  нм.

## **О природе СВЧ-активированного состояния Гиббсита**

*Жужгов А.В.<sup>1,2</sup>, Болотов В.А.<sup>1,2</sup>, Калинин П.В.<sup>2,3</sup>, Танашев Ю.Ю.<sup>1</sup>,  
Пармон В.Н.<sup>1,2</sup>*

1. Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск
2. Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск
3. Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск

Проведено исследование процесса СВЧ активации гиббсита. Установлено, что процесс носит нерезонансный характер по СВЧ полю, а изменения обусловлены специфическим способом подвода энергии к образцу. Показана возможность разделения эффектов дегидратации и кристаллизации аморфной составляющей при СВЧ активации.

## **Фотоактивация люминесценции коллоидных квантовых точек и мерцание их флуоресценции**

*Бричкин С.Б.*

ИПХФ РАН, г.Черноголовка

Фотоактивация – мощный инструмент управления люминесцентными характеристиками ККТ, воздействующий на их поверхностные дефекты. Она увеличивает эффективность люминесценции и подавляет блиндинг в ККТ. В докладе анализируются современные механизмы фотоактивации люминесценции и особенности ее взаимосвязи с эффектом блиндинга.

## **Фотоизомеризация двойной связи как действующее начало молекулярных устройств: роторов, автомобилей, переключателей, логических вентилях**

*Будыка М.Ф.*

ИПХФ РАН, Черноголовка

В докладе рассмотрены примеры молекулярных структур, способных целенаправленно вращаться, перемещаться по плоскости, переключаться между разными состояниями и совершать логические операции, в основе функционирования которых лежит реакция фотоизомеризации двойной связи.

## **Синтез и некоторые свойства гидроксидов Ni-Cd**

*Вальнюкова А.С.<sup>1,2</sup>, Захаров Ю.А.<sup>1,2</sup>, Пугачев В.М.<sup>1</sup>*

1. КемГУ, г. Кемерово

2. ФИЦ УУХ СО РАН, г. Кемерово

В настоящей работе описываются результаты в области получения и исследования свойств промежуточных продуктов высокодисперсных металлических порошков в системе Ni–Cd.

## **Гибридные материалы медицинского назначения: металло-паровой синтез, строение и свойства**

*Васильков А.Ю.*

ИНЭОС РАН, Москва

Представлены возможности использования метода металло-парового синтеза (МПС), позволяющего получать наночастицы металлов (Cu, Ag, Au), для создания искусственных эндопротезов, obturаторов, перевязочных, хирургических шовных и других материалов медицинского назначения.

## **Асимметрический металлокатализ с участием бисдиамидофосфитов**

*Гаврилов К.Н.*

РГУ имени С.А. Есенина, г. Рязань

Рассмотрено применение бисдиамидофосфитных индукторов хиральности в энантиоселективных Pd-катализируемых реакциях аллильного замещения, дерацемизации, десимметризации и циклоприсоединения, а также в Rh-катализируемых реакциях гидрирования, гидроформилирования и присоединения.

## **Адсорбция водорода на наночастицах золота**

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

ИХФ РАН, Москва

Определены параметры адсорбции молекулярного водорода на поверхности наночастиц золота, нанесенных на высокоориентированный пиролитический графит. На уровне единичных наночастиц установлено, что заполнение поверхности адсорбатом начинается с интерфейса графит-золото с последующим заполнением всей поверхности.

## **Физико-химические свойства, механизмы разложения и взрывное действие ряда разработанных в ЛМУ взрывчатых веществ**

*Голубев В.К.<sup>1,2</sup>, Кланётке Т.М.<sup>2</sup>*

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

Приведены результаты изучения около сорока наиболее интересных и перспективных взрывчатых веществ, разработанных и исследованных в группе энергетических материалов Университета Людвиг-Максимилиана. Около половины из них являются мощными бризантными веществами, а остальные – инициирующими и пластифицирующими.

## **Механохимическое получение карбидов титана и гафния**

*Григорьева Т.Ф.<sup>1</sup>, Толочко Б.П.<sup>1,2</sup>, Логачев П.В.<sup>2</sup>, Анчаров А.И.<sup>1,2,3</sup>,  
Восмериков С.В.<sup>1</sup>, Девяткина Е.Т.<sup>1</sup>, Петрова С.А.<sup>4</sup>, Удалова Т.А.<sup>1</sup>, Павлов Е.А.<sup>5</sup>,  
Ляхов Н.З.<sup>1</sup>*

1. ИХТТМ СО РАН, Новосибирск
2. ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск

3. НГУ, Новосибирск
4. Имет УрО РАН, Екатеринбург
5. ОАО «Красцветмет», Красноярск

Механохимическое взаимодействие в системах Ti – C и Hf – C протекает с образованием на первом этапе ( $\leq 2$  мин активации) механокомпозитов Ti/C и Hf/C, последующим плавлением титана и гафния, растеканием расплавленных металлов по поверхности частиц сажи и практически одновременным образованием карбидов титана и гафния.

### **Механокомпозиты биологически активных органических кислот на основе лекарственного полимера**

*Ворсина И.А., Григорьева Т.Ф., Восмерилов С.В., Девяткина Е.Т., Удалова Т.А., Ляхов Н.З.*

ИХТТМ СО РАН, Новосибирск

Получены механокомпозиты янтарной, лимонной, салициловой кислот на основе лекарственного полимера, поли-N-винилпирролидона, в процессе совместной МА смесей ПВП + кислота в результате разрыва водородных связей в ассоциатах кислот и образования на поверхности полимера активных атомов кислорода.

### **Механохимическое получение ультрадисперсных порошков Si, Ge, Cu, Ag**

*Григорьева Т.Ф.<sup>1</sup>, Горина Е.Н.<sup>2</sup>, Удалова Т.А.<sup>1</sup>, Восмерилов С.В.<sup>1</sup>, Девяткина Е.Т.<sup>1</sup>, Ворсина И.А.<sup>1</sup>, Павлов Е.А.<sup>3</sup>, Ляхов Н.З.<sup>1</sup>*

1. ИХТТМ СО РАН, Новосибирск
2. НГТУ, Новосибирск
3. ОАО «Красцветмет», Красноярск

Механохимическое восстановление  $Me_xO_y$  магнием завершается формированием механокомпозитов (Me/MgO) за 2 - 8 минуты активации. Отделение ультрадисперсных почти сферической формы частиц металлов с размерами  $\sim 50-100$  нм проведено разбавленными растворами кислот. Определены условия их защиты от окисления.

### **Аэрогели на основе восстановленного оксида графена**

*Гудков М.В.<sup>1</sup>, Горенберг А.Я.<sup>1</sup>, Калиниченко В.Н.<sup>1</sup>, Мальцев А.А.<sup>2</sup>, Мельников В.П.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ИХФ РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup>ИБХФ РАН, Москва, Россия

Основной целью работы является получение и исследование перспективных композиционных материалов на основе 2D углеродных наноструктур с определенной архитектурой, препятствующей агрегации графеновых слоев, обеспечивающей стабильность параметров в циклах заряд/разряд, обладающей высокоразвитой поверхностью и высокой электропроводностью, имеющих потенциальную технологическую реализацию в качестве новых электродных материалов и сенсоров.

### **Наноструктурированная полиметаллическая система Fe-Co-Ni**

*Датий К.А.<sup>1,2</sup>, Захаров Ю.А.<sup>1,2</sup>, Пугачев В.М.<sup>1</sup>*

1 Кемеровский государственный университет, г. Кемерово

2 Федеральный исследовательский центр угля и углехимии СО РАН, г. Кемерово

Доклад содержит обобщение и анализ полученных результатов изучения свойств наноструктурированных порошков Fe-Co-Ni: морфология частиц, фазовые составы и структурные параметры, состав поверхности и термостимулированные превращения, а также магнитные свойства.

### **Количественная оценка объемов метастабильных фаз кремния Si-II, Si-XII, Si-III и $\alpha$ -Si, формируемых при индентировании исходных и предварительно облученных монокристаллов**

*Дмитриевский А.А., Ефремова Н.Ю., Гусева Д.Г., Васюков В.М., Жигачев А.О., Хабарова Е.И.*

ТГУ имени Г.Р. Державина, Тамбов

Проведена количественная оценка объемов метастабильных фаз кремния Si-II, Si-XII, Si-III и  $\alpha$ -Si в локально деформированной (пирамида Берковича) области необлученных и предварительно облученных монокристаллов. Установлено, что предварительное облучение кремния бета-частицами от источника <sup>90</sup>Sr

### **Квантово-химическое изучение деоксигенации сложных эфиров на Pt-Sn катализаторах**

*Завелев Д.Е.<sup>1,2</sup>, Цодиков М.В.<sup>1,2</sup>, Жидомиров Г.М.<sup>3,4</sup>*

1. ИНХС РАН, Москва

2. ИХФ РАН, Москва

3. ИК СО РАН, Новосибирск
4. ИОХ РАН, Москва

Методом DFT изучены основные стадии деоксигенации сложных эфиров на Pt-Sn/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> катализаторах, содержащих наноразмерные фазы интерметаллидов. Получены структуры интермедиатов и переходных состояний, величины активационных барьеров. Выдвинуты гипотезы о роли активных центров катализатора в изучаемой реакции.

### **Расчет поверхностного натяжения жидких и твердых чистых металлов и их сплавов**

*Зайцева Е.С., Рабинович А.Б., Товбин Ю.К.*  
ГНЦ РФ НИФХИ им. Л.Я.Карпова, Москва

Разработанный подход численного анализа поверхностного натяжения границ одно- и двухкомпонентных металлических расплавов позволил получить результаты по температурной и концентрационной зависимостям поверхностного натяжения, коррелирующие с экспериментом, а также предсказать размерную зависимость поверхностного натяжения малых капель расплавов.

### **Нарушение симметрии в возбужденных квадрупольных молекулах**

*Иванов А.И.*  
Волгоградский государственный университет. г. Волгоград

Развита модель, описывающая нарушение симметрии распределения заряда в возбужденных симметричных молекулах вида: A<sub>L</sub>-D-A<sub>R</sub>, где D – донор электронов, A<sub>L</sub> и A<sub>R</sub> – идентичные акцепторы. Выполнен фитинг зависимости расщепления полос характеристических колебаний, локализованных на разных акцепторах, от полярности растворителя. Работа поддержана грантом РФФ № 16-13-10122

### **Глобальная оптимизация структуры кластеров и наночастиц платины комбинированным методом DFT/ReaxFF**

*Игнатов С.К.<sup>1</sup>, Разуваев А.Г.<sup>1</sup>, Гаджиев О.Б.<sup>1,2</sup>*

1. ННГУ, г. Нижний Новгород
2. ИХВВ, г. Нижний Новгород

Структура кластеров Pt<sub>n</sub> n=2–10, 13, 19, 24, 38 оптимизирована на уровнях UBLYP/CRENBS, UBPW91/CRENBS, UBPW91/LANL2DZ и UPBE0/LANL08. Эти результаты использованы для репараметризации атома платины в силовом



поле ReaxFF. С использованными параметрами проведена глобальная оптимизация кластеров Pt<sub>n</sub> с n в интервале 13–201.

### **Кинетика газофазной реакции метанола с трихлоридом бора**

*Капралова Г.А., Чайкин А.М.*

ИХФ РАН, Москва

Впервые, на примере газофазной реакции  $\text{BCl}_3 + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OBCl}_2 + \text{HCl}$ , показано успешное применение спектрального комплекса, созданного на основе доступного инфракрасного фурье - спектрографа АФ-3, к исследованию кинетики химических реакций.

### **Перенос катионов щелочных металлов в апротонных полимерных электролитах на основе Нафiona**

*Каюмов Р.Р., Сангинов Е.А., Карелин А.И., Добровольский Ю.А.*

ИПХФ РАН, Черноголовка

Работа была направлена на изучение влияния природы однозарядных катионов щелочноземельных металлов, на транспортные свойства и эксплуатационные характеристики полимерного электролита на основе перфторированной мембраны типа Нафион<sup>®</sup> и диметилсульфооксида в качестве пластификатора для электрохимических источников тока.

### **Взаимодействие водорода с единичными нанесенными наночастицами меди**

*Кирсанкин А.А., Сарвадий С.Ю., Гришин М.В., Шуб Б.Р.*

ИХФ РАН, Москва

Методами сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии были изучены адсорбционные свойства наночастиц меди, синтезированных методом пропитки подложки раствором прекурсора. В качестве подложки использовался высокоориентированный пиролитический графит.

### **Кинетика и термохимия активированной N=N связи в реакциях циклоприсоединения.**

*Киселёв В.Д., Корнилов Д.А., Аникин О.В.*

К(П)ФУ, Казань

Необычное и благоприятное сочетание повышенной электрофильности N-атомов в N=N связи 4-фенил-1,2,4-тризолин-3,5-диона (ФТАД) с пониженной

энергией разрыва реагирующей  $\pi$ -связи в  $N=N$  приводит к резкому (на 5-8 порядков) увеличению скорости реакций  $[4\pi+2\pi]$ -;  $[2\pi+2\pi+2\pi]$ -;  $[2\pi+2\sigma+2\sigma]$ -;  $[2\pi+2\pi]$ -циклоприсоединения и Альдер-енового синтеза.

### **Возбуждение молекул в сильном электрическом поле, генерируемом при влете этих молекул в зазоры между металлическими наночастицами.**

*Кожевин В.М., Ильющенко Д.С., Горохов М.А., Гуревич С.А.*  
ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург

Рассмотрены условия возбуждения резонанса колебаний электрического поля в зазорах между металлическими наночастицами, возникающих при влете молекул в эти зазоры, с собственными частотами молекул.

### **Взаимодействие заряда с металлом**

*Кожушнер М.А.<sup>1,2</sup>, Посвянский В.С.<sup>1,2</sup>, Лидский Б.В.<sup>1</sup>*  
<sup>1</sup>ИХФ РАН, Москва  
<sup>2</sup>МФТИ, Долгопрудный

Строгий расчёт термодинамического равновесия системы «металл + внешний заряд» показал, что общепринятое положение о том, что электрическое поле не проникает вглубь металла, неверно. Поле проникает в металл, и взаимодействие заряда с металлом заметно больше, чем стандартное взаимодействие с зеркальным изображением заряда, оно зависит от характеристик электронной системы металла, от знака заряда и несколько иначе, чем стандартное, зависит от величины заряда.

### **Получение водородсодержащего газа путем воздействия микроволнового излучения на тяжелые нефтяные остатки**

*Константинов Г.И., Чистяков А.В., Курдюмов С.С., Передерий М.А.,  
Цодиков М.В.*  
ИНХС РАН, Москва

В работе представлены результаты по изучению закономерностей превращения тяжелых нефтяных остатков, в смеси с углеродным сорбентом, в водородсодержащий газ и дополнительное количество жидкой углеводородной фракции при воздействии МВИ. Установлено различие в механизмах крекинга субстрата при МВ- воздействии и традиционном нагреве.

## **Оценка индукционного периода теплового взрыва энергетических материалов по данным термического анализа**

*Коптелов А.А., Rogozina A.A., Матвеев А.А.*  
ФГУП “ФЦДТ “Союз”, г. Дзержинский

Приведены результаты расчета индукционных периодов теплового взрыва образцов некоторых энергетических материалов (ЭМ) при различных значениях температур окружающей среды. Необходимые для расчета кинетические параметры термического разложения ЭМ найдены методом ДСК при давлениях до 10 МПа.

## **Сольвофобное ускорение реакции Дильса-Альдера между 9,10-дигидроксиметилантраценом и N-этилмалеинимидом**

*Корнилов Д.А., Киселёв В.Д., Седов И.А.*  
К(П)ФУ, г. Казань

В данной работе нами было обнаружено сольвофобное ускорение реакции 9,10-дигидроксиметилантрацена с N-этилмалеинимидом. Нами было установлено, что скорость данной реакции возрастает при переходе от растворителя с низкой энергией межмолекулярного взаимодействия к ассоциированным растворителям и достигает максимального значения в воде.

## **Исследование эффективности различных способов аминирования магнитных наночастиц для медицинского применения**

*Варламов А.С.<sup>1</sup>, Бабикова К.Ю.<sup>1</sup>, Гареев К.Г.<sup>1</sup>, Евреинова Н.В.<sup>2,3</sup>,  
Королев Д.В.<sup>2,4</sup>*

<sup>1</sup>СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург

<sup>2</sup>СЗФМИЦ им. В. А. Алмазова Минздрава России, Санкт-Петербург

<sup>3</sup>СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург

<sup>4</sup>ПСПбГМУ им. И.П. Павлова Минздрава России, Санкт-Петербург

В работе исследована эффективность аминирования двух типов магнитных наночастиц глицином из водной среды и 3-аминопропилтриэтоксисиланом из водной среды и этанола. Сделан анализ содержания доступных аминогрупп по емкости флуоресцентного красителя индоцианина зеленого.

## **Структурные исследования биомакромолекул методами масс-спектрометрии сверхвысокого разрешения**

*Костюкевич Ю.И.<sup>1,2,3</sup>, Николаев Е.Н.<sup>1,2,3</sup>*

1. Сколковский институт науки и технологий, г.Москва, Московская обл.

2. ИНЭПХФ им. В.Л.Тальрозе РАН, г. Москва,
3. Московский физико-технический институт г. Долгопрудный

В докладе описывается разработанный авторами подход к исследованию структуры индивидуальных биомакромолекул, основанный на комбинации масс-спектрометрии сверхвысокого разрешения и изотопного обмена. Удалось исследовать структуры отдельных молекул, входящих в состав таких сложных смесей как нефть, гуминовые вещества, продукты высокотемпературной переработки органики, взвешенное органическое вещество.

### **Природа концентрационных пределов распространения волны горения в порошковой и гранулированной смеси $Ti+C+xAl_2O_3$**

*Кочетков Р.А., Сеплярский Б.С.*  
ИСМАН, Черноголовка

В работе проведено исследование применимости теории перколяции для описания процессов горения гранулированных СВС-составов. Установлено полное качественное и хорошее количественное соответствие экспериментальных результатов с выводами теории перколяции для гранулированных смесей, разбавленных крупными инертными частицами.

### **СВ синтез карбида титана с никелевой связкой из гранулированной шихты насыпной плотности**

*Кочетков Р.А., Сеплярский Б.С., Абзалов Н.И.*  
ИСМАН, Черноголовка

В работе показана возможность СВ синтеза из гранулированной шихты карбида титана с никелевой связкой. Гранулы сохраняют свои размеры и, в отличие от порошковой смеси, не спекаются друг с другом. Установлено, что горение смесей  $Ti-C-Ni$  происходит двухстадийно, с разгоранием после прохождения фронта горения.

### **Полимерные композиционные материалы на основе термоотверждаемых эпоксидных связующих, модифицированных алмазосодержащими наполнителями**

*Куркин Т.С.<sup>1</sup>, Тикунова Е.П.<sup>1</sup>, Яблокова М.Ю.<sup>2</sup>, Кечекьян А.С.<sup>1</sup>,  
Голубев Е.К.<sup>1</sup>, Долматов В.Ю.<sup>3</sup>, Озерин А.Н.<sup>1</sup>*

1. ИСПМ, Москва
2. МГУ, Москва

### 3. ЗАО «Алмазный центр», Санкт-Петербург

Исследованы структурные особенности и физико-химические свойства перспективных термореактивных связующих, модифицированных алмазосодержащими наполнителями – детонационными наноалмазами и наноалмазной шихтой. Получены экспериментальные результаты, демонстрирующие возможность создания препрегов с использованием углеродной ткани 1.5 К и модифицированного детонационной алмазной шихтой связующего на основе смеси эпоксидных смол Epikote828/Epikote154.

#### **Квантовая модель однодоменного магнитомягкого ферромагнетика**

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

В работе предложена квантовая модель магнитомягкого ферромагнетика на примере одного домена кристалла  $\alpha$ -Fe. Получены нелинейные уравнения движения намагниченности домена. Параметры модели найдены из сравнения с экспериментальными данными по магнитной анизотропии железа. Решение нелинейных уравнений для одного домена имеет характерный вид петли гистерезиса.

#### **Магниточувствительность бактерий *E. coli***

*Летута У.Г.*  
ОГУ, Оренбург

В данной работе исследовалось проявление магнитно-изотопных эффектов  $^{25}\text{Mg}$  и  $^{67}\text{Zn}$  и магнитно-полевых эффектов в росте и развитии клеток *E. coli*. Экспериментально были определены ростовые характеристики (колониеобразующая способность, скорость роста) и биохимические показатели (внутриклеточное содержание АТФ и различных химических элементов), свидетельствующие о магниточувствительности бактерий. Диапазон магниточувствительности был определён с помощью теоретических расчётов и подтверждён экспериментально. *Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-60021 мол\_а\_дк.*

## **Дефектно примесный фликкер-шумовой метод информационного анализа в микро- и нанотехнологии**

*Маковийчук М.И.*  
ЯФ ФТИ РАН, Ярославль

Проанализированы возможности предлагаемого метода дефектно-примесной фликкер-шумовой спектроскопии структурно-неупорядоченных кремниевых систем для информационного анализа микро- и нанотехнологии

## **Горение модельных составов на основе бора и его соединений с перхлоратом аммония**

*Мееров Д.Б.<sup>1</sup>, Мельников И.Н.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ИХФ РАН, Москва

<sup>2</sup>НИЯУ «МИФИ», Москва

В работе исследованы физико-химические характеристики различных образцов бора, а также параметры горения и конденсированные продукты сгорания модельных составов на его основе.

## **Распространение газовой детонации при локальном воздействии**

*Михалкин В.Н.<sup>1,2</sup>, Медведев С.П.<sup>1</sup>, Хомик С.В.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ИХФ РАН, Москва

<sup>2</sup>АГПС МЧС РФ, Москва

Рассмотрены геометрические и химические локальные воздействия на детонационную волну в газах. В обоих случаях детонационная волна разрушается, если энергия и мощность реинициирования после локального воздействия оказывается меньше критической. Последствия локального воздействия на детонационную волну определяли с помощью эмпирической модели для оценки критической энергии и мощности инициирования детонации.

## **Особенности свойств композитов на основе смесей производных целлюлозы, термопластов и компатибилизаторов**

*Мясоедова В.В.<sup>1</sup>, Лушкова А.В.<sup>1</sup>, Мелешкина А.М.<sup>2</sup>*

1. ИХФ РАН, г. Москва

2. МАМИ, Институт инженерной экологии и химического машиностроения, г. Москва

Представлены экспериментальные данные по влиянию состава смесей термопластичных эфиров целлюлозы с синтетическими полимерами и

компатибилизаторами на физико-химические и физико-механические параметры композитов. Дана интерпретация повышенных значений величин удлинения при разрыве формованных изделий при определенных соотношениях компонентов на основе систематического физико-химического исследования свойств полимерных смесей различного состава.

### **Воспламенение смесей ацетона с кислородом в ударных волнах.**

*Власов П.А.<sup>1,2</sup>, Назарова Н.В.<sup>1,2</sup>, Смирнов В.Н.<sup>1</sup>, Тереза А.М.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ИХФ РАН, Москва.

<sup>2</sup>НИЯУ «МИФИ», Москва

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

### **Необычная региоселективность $C_1$ - $C_{70}(CF_3)_{10}$ в реакции Дильса-Альдера**

*Некрасов В.М.<sup>1,2</sup>, Дутлов А.Е.<sup>1,2</sup>, Бубнов В.П.<sup>1</sup>, Кареев И.Е.<sup>1</sup>*

1. ИПХФ РАН, Черноголовка

2. ФФФХИ МГУ, Москва

В данной работе мы разработали методику получения циклоаддукта  $C_1$ - $C_{70}(CF_3)_{10}$  с бутадиеновым фрагментом. Впервые в реакции Дильса-Альдера  $C_1$ - $C_{70}(CF_3)_{10}$  с бутадиен сульфеном был синтезирован один региоизомер  $C_1$ - $C_{70}(CF_3)_{10}C_4H_6$  и охарактеризован масс-спектрометрией, оптической, ИК-, <sup>1</sup>H и <sup>19</sup>F ЯМР спектроскопией и DFT расчетами.

### **Биоразлагаемые комплексоны. Влияние оптической изомерии на их кислотно-основные характеристики**

*Никольский В.М., Логинова Е.С., Волчкова Е.С.*

ТвГУ, Тверь

Синтезирован оптически активный L-изомер N-(карбоксиметил)аспарагиновой кислоты (L-КМАК). Выявлена высокая основность атома азота L-КМАК, которая проявляется в образовании цикла между ионизированной  $\alpha$ -карбоксовой группой, атомом азота протонированной аминогруппы и атомом кислорода молекулы воды.

## **Строение и свойства сопряженных органических радикалов**

*Чернова Е.М.<sup>1</sup>, Орлов М.Ю.<sup>1</sup>, Ситников В.Н.<sup>1</sup>, Туровцев В.В.<sup>1,2</sup>, Орлов Ю.Д.<sup>1</sup>*

1. Тверской государственный университет, г. Тверь

2. Тверской государственный медицинский университет, г. Тверь

Изучение строения и свойств сопряженных органических радикалов (СОР) проведено на основании квантовомеханического подхода. Исследованы структурные, электронные, энергетические, спектральные и термодинамические свойства СОР. Сделаны выводы о закономерностях распределения электронной и спиновой плотности в этих соединениях.

## **Стимулированная триоксалатным комплексом железа и фульвокислотой фотодеградация гербицидов в водных растворах**

*Поздняков И.П.<sup>1,2</sup>, Шерин П.С.<sup>3</sup>, Плюснин В.Ф.<sup>1,2</sup>*

1. ИХКГ СО РАН, Новосибирск

2. НГУ, Новосибирск

3. МТЦ СО РАН, Новосибирск

Методами стационарного фотолиза и ВЭЖХ показано, что деградация гербицидов 24-DB и амитрол при УФ возбуждении комплекса  $\text{Fe}(\text{Ox}_3)^{3-}$  и фульвокислоты в нейтральных водных растворах связана с генерацией активных форм кислорода. Определены квантовые выходы и подобраны оптимальные условия для фотодеградации целевого соединения.

## **Кориолисово взаимодействие и вторичные кинетические изотопные эффекты в реакции третичных фосфинов с активированными алкенами**

*Салин А.В.*

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань

Обнаружено, что интерпретировать вторичные кинетические изотопные эффекты для реакции трифенилфосфина с 2-*d*-акрилонитрилом и *d*<sub>3</sub>-акрилонитрилом в уксусной кислоте невозможно на основе приближения Борна-Оппенгеймера и необходимо привлечение концепции, основанной на колебательно-вращательном (кориолисовом) взаимодействии.

## **Влияние $\text{Fe}(\text{CO})_5$ на воспламенение водородно-кислородных смесей в отраженных ударных волнах.**

*Власов П.А.<sup>1,2</sup>, Селеткова А.В.<sup>1,2</sup>, Смирнов В.Н.<sup>1</sup>, Тереза А.М.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ИХФ РАН, Москва.



<sup>2</sup>НИЯУ «МИФИ», Москва.

Проведено экспериментальное и теоретическое изучение ингибирующего влияния  $\text{Fe}(\text{CO})_5$  на самовоспламенение водородно-кислородных смесей разбавленных аргоном за отраженными ударными волнами.

### **Новые каталитические реакции гетероядерных комплексов палладия и платины**

*Столяров И.П., Черкашина Н.В., Якушев И.А.*  
ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

Гетероядерные ацетатные комплексы палладия и платины проявляют необычную активность в гомогенных каталитических реакциях гидрирования, переноса водорода и окисления органических соединений. Обсуждаются взаимное влияние атомов различных металлов в комплексах на их реакционную способность и механизмы каталитических реакций.

### **Влияние ПАВ на агрегативную устойчивость нефти по данным методов динамического рассеяния света и электронных спектров поглощения в ультрафиолетовой и видимой областях**

*Сулейманова С.А., Исмаилов Э.Г.*

Институт нефтехимических процессов НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан

Приведены результаты исследования влияния ПАВ на агрегативную устойчивость асфальтено-смоло-парафиновых структур в образцах сырой нефти из ряда азербайджанских месторождений методами измерения вязкости, динамического рассеяния света и электронной спектроскопии в ультрафиолетовой и видимой областях в диапазоне 293-333К.

### **Образование наночастиц железа, инкапсулированных в углеродную оболочку, в ударных волнах**

*Власов П.А.<sup>1,2</sup>, Смирнов В.Н.<sup>1</sup>, Тереза А.М.<sup>1</sup>, Сычев А.Е.<sup>3</sup>, Щукин А.С.<sup>3</sup>,  
Стрелецкий А.Н.<sup>1</sup>, Борунова А.Б.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ИХФ РАН, Москва.

<sup>2</sup>НИЯУ «МИФИ», Москва.

<sup>3</sup>ИСМАН, Черноголовка, М.О.

Проведено экспериментальное и расчетно-теоретическое исследование процесса образования наночастиц железа, инкапсулированных в углеродную оболочку, в ударных волнах с использованием электронно-микроскопического анализа и детальных кинетических расчетов.

## **Жидкие активные среды на $\text{Yb}^{3+}$ для лазеров с диодной накачкой**

*Тихонов Г.В., Серёгина Е.А., Серёгин А.А., Бабкин А.С.*  
ГНЦ РФ-ФЭИ, Обнинск

Рассмотрены характеристики  $\text{Yb}^{3+}$  в бинарных апротонных растворителях  $\text{POCl}_3\text{-MCl}_x$ ,  $\text{SOCl}_2\text{-MCl}_x$  и  $\text{SO}_2\text{Cl}_2\text{-GaCl}_3$  (где  $\text{MCl}_x$  – кислота Льюиса), впервые приготовлены жидкие иттербийсодержащие лазерно-активные среды для диодной накачки.

## **Новый гибридный материал $\text{Bi(III)@MIL-101}$ на основе мезопористого координационного полимера. Структура, свойства.**

*Трубина С.В.<sup>1</sup>, Эренбург С.Б.<sup>1,2</sup>, Коваленко К.А.<sup>1,3</sup>, Квашнина К.О.<sup>4,5</sup>, Федин В.П.<sup>1,3</sup>*

1. ИНХ СО РАН, Новосибирск
2. ИЯФ СО РАН, Новосибирск
3. НГУ, Новосибирск
4. European Synchrotron Radiation Facilities, Grenoble, France
5. Helmholtzzentrum Dresden-Rossendorf, Institute of Resource Ecology, Dresden, Germany

Структура фотокатализатора, содержащего комплекс  $\text{Bi(III)}$  внутри матрицы MIL-101 исследована с помощью спектроскопии рентгеновского поглощения (EXAFS). Предложена структурная модель в виде трехядерных кластеров  $\text{Bi}$  с координацией 6, которые образуются внутри макрополостей матрицы MIL-101 в процессе синтеза.

## **Сонолиз суспензий кристаллов соединений лантанидов в углеводородах**

*Тухбатуллин А.А.<sup>1</sup>, Бурангулова Н.Ф.<sup>2</sup>, Абдрахманов А.М.<sup>1</sup>, Шарипов Г.Л.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа

<sup>2</sup>Башкирский государственный университет, г. Уфа

Ультразвуковая обработка суспензий кристаллов неорганических соединений лантанидов в углеводородах ( $\text{C}_{11}\text{H}_{24}$ ,  $\text{C}_{12}\text{H}_{28}$ ,  $\text{C}_{16}\text{H}_{34}$ ,  $\text{C}_{17}\text{H}_{36}$ ,  $\text{C}_{10}\text{F}_{18}$ ) приводит к образованию высших углеводородов  $\text{C}_{13}\text{-C}_{20}$ . В спектрах сонотриболюминесценции суспензий регистрируются радикалы  $\text{SH}$  и  $\text{C}_2$ , что является дополнительным подтверждением появления во время сонолиза радикальных продуктов расщепления некоторых углеводородов, которые при взаимодействии друг с другом могут образовывать более сложные продукты.

## **Математическая модель многостадийного фотоиндуцированного переноса электрона в недебаевском полярном растворителе**

*Феськов С.В.*

ВолГУ, Волгоград

Работа посвящена построению модели многостадийной реакции фотоиндуцированного переноса электрона в полярной среде, учитывающей многомодовый характер релаксации недебаевского растворителя и переходы между различными центрами локализации электрона внутри супрамолекулярной донорно-акцепторной системы.

## **О природе парамагнитных комплексов никеля в каталитических реакциях формирования и разрыва С-С-связи**

*Флид В.Р., Шамсиев Р.С., Дураков С.А., Замалютин В.В.*

МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва

Парамагнитные комплексы никеля обнаружены в реакциях гомо- и кросс-сочетания арилгалогенидов и циклодимеризации норборнадиена в качестве вероятных интермедиатов. Теоретически и экспериментально изучены закономерности их формирования, предложены непротиворечивые механизмы. Тем не менее, роль Ni(I) и Ni(III) в катализе остается неясной.

## **Взаимодействие нанесенных платиновых и борорганических наночастиц с газообразными реагентами.**

*Харитонов В.А., Быховский М.Я., Гатин А.К., Гришин М.В., Корчак В.Н., Сарвадий С.Ю., Слуцкий В.Г., Шуб Б.Р.*

ИХФ РАН, Москва

Установлены форма, размеры и электронное строение наночастиц платины а также их адсорбционные свойства по отношению к водороду, кислороду и воде. Исследованы каталитические свойства нанесенных платиновых и борорганических наночастиц, в реакциях разложения аммиака и гидрирования этилена.

## **Охлаждение мелкодисперсных полупроводников постоянным или переменным электрическим током**

*Харламов В.Ф.*

Орловский госуниверситет, Орел

Проанализированы процессы превращения энергии, сопровождающие поляризацию мелкодисперсных полупроводников. Рассмотрены неизвестные

ранее термоэлектрические эффекты. В отличие от аналогов (эффекты Пельтье и Зеебека) они описываются интегральными уравнениями. Теоретические результаты соответствуют экспериментальным данным.

**Электронное сродство изомерных молекул полициклических ароматических углеводородов и автонеutralизационное время жизни молекулярных отрицательных ионов**

*Хатымов Р.В., Муфтахов М.В., Шукин П.В.*  
ИФМК УНЦ РАН, г. Уфа

Для ряда полициклических ароматических углеводородов, представляющих гомологические и изомерные серии соединений, в газовой фазе исследовано образование молекулярных отрицательных ионов и измерено их время жизни относительно автоотщепления электрона. Выявлена и объяснена связь последнего с величиной электронного сродства молекул.

**Молекулярный механизм гидролиза антибиотиков металло- $\beta$ -лактамазами**

*Хренова М.Г., Кулакова А.М., Капуста Д.П., Фирсов Д.А.*  
Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва

В работе представлен молекулярный механизм гидролиза антибиотиков металло- $\beta$ -лактамазами, полученный по результатам расчетов комбинированным методом квантовой механики / молекулярной механики. Проведен анализ структура-свойство для скоростей гидролиза ряда антибиотиков.

**Критическое состояние CO<sub>2</sub> как пример стохастической наносборки.**

*Чайкина Ю.А.*  
ИХФ РАН, Москва

Предложен молекулярно-кинетический механизм перехода флюида CO<sub>2</sub> через критическое состояние. Показано, что формирование критического состояния CO<sub>2</sub> может быть связано с эффектом динамического захвата при парных столкновениях молекул и представляет собой пример стохастической наносборки.

**Влияние длины парафиновой части ионных жидкостей на основе пропаргил – имидазола на параметры самовоспламенения в смеси с окислителем**

*Стовбун С.В., Щеголихин А.Н., Черепанов А.А., Хомик С.В., Медведев С.П.*  
ИХФ РАН, Москва

Проведен синтез гомологического ряда ионных жидкостей на основе пропаргил – имидазола имеющих различную длину парафиновой части молекулы и выполнены измерения задержки самовоспламенения полученных соединений по модифицированной методике падающей капли.

**Особенности течения при детонации водородовоздушной смеси, ограниченной тонкостенной быстроразрушающейся оболочкой**

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

На основе численного моделирования выявлено влияние быстроразрушающейся оболочки на ячеистую структуру фронта детонационной волны и установлены максимально допустимые времена разрыва, при которых можно пренебречь влиянием оболочки на параметры взрывных процессов в водородсодержащих смесях.

**Топохимические реакции наночастиц оксидов железа в катализаторах синтеза Фишера-Тропша.**

*Чернавский П.А., Панкина Г.В., Казак В.О.*  
Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва

Исследована кинетика и механизм восстановления нанесенных оксидов железа в катализаторах синтеза Фишера-Тропша. Показано принципиальное различие в механизмах восстановления оксидов в зависимости от типа носителя и присутствия промотора калия.

**Превращение сверхкритических этанола и изопропанола в бутанол-1 и пентанол-2 в присутствии гетерогенных катализаторов**

*Чистяков А.В.<sup>1,2</sup>, Жарова П.А.<sup>1</sup>, Николаев С.А.<sup>3</sup>, Цодиков М.В.<sup>1,2</sup>*  
<sup>1</sup> ИХС РАН, Москва  
<sup>2</sup> ИХФ РАН, Москва  
<sup>3</sup> МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

Обнаружен эффект синергетического действия биметаллических Au-M/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> катализаторов, где М – Cu, Ni в процессах прямого превращения этанола в

линейные  $\alpha$ -спирты и  $\beta$ -алкилирования изопропанола этанолом. С использованием широкого ряда методов структурного анализа установлены корреляции между каталитической активностью и строением нанесенных металлических центров.

### **Теоретическое изучение механизма восстановления малых молекул с кратными связями полиядерными комплексами молибдена.**

*Шестаков А.Ф.*

Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка.

Теоретически исследована реакционная способность тетраядерного комплекса  $\text{Mo}^{\text{III}}$ , моделирующего активный центр нитрогеназы, по отношению к малым молекулам с кратной связью. Полученные энергетические профили реакций их восстановления позволяют интерпретировать экспериментальные каталитические данные.

### **Влияние природы оксидного носителя рабочего электрода на свойства потенциометрических сенсоров на водород и монооксид углерода**

*Леонова Л.С., Шмыглева Л.В., Добровольский Ю.А.*  
ИПХФ РАН, Черноголовка

Показано влияние природы оксидных носителей катализатора на основе диоксида титана, допированного рутением ( $\text{TiO}_2(\text{Ru})$ ) и оксидов олова и сурьмы ( $\text{SnO}_2\text{-SbO}_x$ ) на чувствительность, быстродействие, стабильность потенциометрического сенсора на водород и монооксид углерода при естественных температурах.

### **Кинетика распада возбужденного синглетного состояния в органических полупроводниках. Проявление миграции T-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 T-экситонов, проявляющийся в особенностях долговременной асимптотики кинетики распада.

## **Диффузия и деформации в гетеросистемах со сверхрешетками GaN/AlN**

*Эренбург С.Б.<sup>1,2</sup>, Трубина С.В.<sup>1</sup>, Журавлев К.С.<sup>3</sup>, Малин Т.В.<sup>3</sup>, Печ Б.<sup>4</sup>*

1. ИНХ СО РАН, Новосибирск

2. ИЯФ СО РАН, Новосибирск

3. ИФП СО РАН, Новосибирск

4. Институт технической физики и материаловедения, Будапешт, Венгрия

Методом аммиачной МЛЭ синтезированы многослойные образцы с предельно узкими квантовыми ямами GaN в матрице AlN. С использованием метода EXAFS- спектроскопии, HRTEM, малоуглового рассеяния определены параметры микроструктуры и установлена их связь с морфологией и оптическими свойствами GaN/AlN сверхрешеток.

### **Влияние способа формирования пористой структуры носителей на активность катализаторов нефте-газопереработки**

*Юнусов М.П., Исаева Н.Ф., Гуломов Ш.Т., Саидов У.Х., \*Маматкулов Ш.И.*

Узбекский научно-исследовательский химико-фармацевтический институт,

\*Учебно-экспериментальный Центр высоких технологий.

г. Ташкент. Узбекистан.

В данной работе исследованы пути синтеза алюмооксидных носителей катализаторов электрохимическим анодированием алюминиевой фольги. Разработана технология приготовления алюмокаолиновых носителей с бимодальным распределением пор по радиусам 4-5 и 7-10 нм с изучением взаимосвязей текстуры носителей, дисперстности молибдатных структур в оксидной форме, а также испытанием активности синтезированных образцов.

# Стендовые доклады

## **Получение и каталитические свойства ферромагнитных биметаллических наночастиц на основе кобальта.**

*Абдрашитов Г.О., Тверьянович Ю.С.*  
СПбГУ, г. Санкт-Петербург.

Исследованы процессы формирования моно- и биметаллических наночастиц на основе кобальта при лазерной абляции в растворе. Исследовано влияние внешнего магнитного поля, позволяющее получать узкодисперсные ансамбли наночастиц *in situ*. Изучены каталитические свойства частиц.

## **Биораспределение и фармакокинетика фуллерена C<sub>60</sub>, введенного в форме водной дисперсии dnC<sub>60</sub>**

*Андреев С.М., Барабошкина Е.Н., Шершакова Н.Н., Смирнов В.В.,  
Егоренков Е.А., Шабанова Д.Д., Хаитов М.Р.*  
ФГБУ "ГНЦ Институт иммунологии" ФМБА России, Москва

Проведены исследования по фармакокинетике и биораспределению фуллерена C<sub>60</sub> при введении мышам водной дисперсии dnC<sub>60</sub>. Установлено, что фуллерен при парентеральном введении распределяется по многим тканям, но выводится из организма в течение 72 ч, главным образом через почки и желчные протоки, причем в неизменном виде примерно на 70%.

## **Влияние гидростатического давления, температуры и среды на протекание реакции [2π+2σ+2σ]-циклоприсоединения квадрициклана с 4-фенил-1,2,4-триазолин-3,5-дионом**

*Аникин О.В., Киселёв В.Д., Корнилов Д.А., Никитина Т.В.*  
К(П)ФУ, г. Казань

В данной работе нами изучена реакция [2π+2σ+2σ]-циклоприсоединения квадрициклана, которая в некоторой степени подобна [2π+2σ]-циклоприсоединению диенофилов с напряженными циклопропановыми системами. Изучено влияние гидростатического давления, температуры и среды на скорость реакции квадрициклана с 4-фенил-1,2,4-триазолин-3,5-дионом.



## **Кинетика и термохимия реакции $[2\pi+2\sigma+2\sigma]$ -циклоприсоединения между квадрицикланом и тетрацианоэтиленом**

*Аникин О.В., Киселёв В.Д., Корнилов Д.А.*  
К(П)ФУ, г. Казань

В данной работе нами определены кинетические и термохимические параметры реакции циклоприсоединения квадрициклана с тетрацианоэтиленом и сопоставлены с полученными ранее параметрами для реакций тетрацианоэтилена с участием изомерных диенов: норборнадиена, циклогептатриена, а также с рядом 1,3-диенов.

## **Особенности превращения органических субстратов в гибридном мембранно-каталитическом реакторе**

*Антонов Д.О.<sup>1</sup>, Федотов А.С.<sup>1</sup>, Уваров В.И.<sup>2</sup>, Хаджиев С.Н.<sup>1</sup>, Цодиков М.В.<sup>1</sup>*  
1. ИНХС РАН, Москва  
2. ИСМАН, г. Черноголовка

Методом СВС разработан пористый мембранно-каталитический конвертер для высокоскоростной конверсии органических субстратов, а именно: процессов парового и углекислотного риформинга продуктов ферментации биомассы и диметилового эфира (ДМЭ), а также процесса дегидрирования бутена в бутадиев с отводом ультрачистого водорода.

## **Углекислотный риформинг лигнина в присутствии наноразмерных катализаторов при стимулировании микроволновым излучением**

*Арапова О.В.<sup>1</sup>, Чистяков А.В.<sup>1</sup>, Цодиков М.В.<sup>1</sup>, Васильков А.Ю.<sup>2</sup>*  
<sup>1</sup> ИНХС РАН, Москва  
<sup>2</sup> ИНЭОС РАН, Москва

Разработаны подходы к плазменно-каталитическому углекислотному риформингу лигнина, содержащему частицы Ni-, Fe и Ni-Fe при стимулированной микроволновым излучением температуре 700-800 °С. Полученные результаты позволяют минимизировать количество используемого катализатора и предложить эффективный путь производства водорода и синтез-газа из отходов лигнина.

## **Эффект наночастиц SiO<sub>2</sub> на сопротивление межфазной границы нанокомпозитный полимерный электролит/литиевый электрод**

*Баймуратова Г.Р., Игнатова А.А., Ярмоленко О.В.*  
ИПХФ РАН, г. Черноголовка Московской области

Методом электрохимического импеданса исследовано формирование высокопроводящего твердоэлектролитного слоя (solid electrolyte interphase) на поверхности литиевого электрода с участием наночастиц SiO<sub>2</sub> (средняя размер частиц 7 нм) при контакте с нанокомпозитным полимерным электролитом.

## **Спинзависимый квантовый эффект Зенона в радикальных триадах.**

*Летуа А.С., Бердинский В.Л.*  
Оренбургский государственный университет, Оренбург

Исследованы спиновая и химическая динамики радикальных триад ((R<sub>1</sub>,R<sub>2</sub>),R<sub>3</sub>), содержащих спин-коррелированную радикальную пару (R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>)<sup>T</sup> в триплетном состоянии и неполяризованный радикал R<sub>3</sub>. Процессы, аналогичные спиновому катализу в радикальных триадах, происходят в системах трех квантовых точек (triple quantum dot), где переходы электрона из одной квантовой точки в другую лимитируются спиновыми запретами под названием Pauli's blockade.

## **Графеноподобные частицы из терморасширенного графита на основе тройного соинтеркалата нитрата графита**

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

Путем расслоения под действием ультразвука в жидких средах образцов терморасширенного графита на основе нитрата графита, соинтеркалированного этилформиатом и уксусной кислотой, получены малослойные графеноподобные частицы, содержащие также однослойный графен. Их микроструктура исследована с использованием ПЭМ и спектроскопии КР.

## **Влияние фото- и термо-активации CdSe-ядер на люминесцентные свойства коллоидных квантовых точек CdSe@CdS**

*Бричкин С.Б., Спиринов М.Г., Разумов В.Ф.*  
ИПХФ РАН, г.Черноголовка

Показано, что предварительная активация одновременным световым и тепловым воздействием CdS-ядер, использованных для синтеза ККТ CdSe@CdS, приводит к значительному увеличению их квантового выхода

люминесценции и фотостабильности в сравнении с ККТ CdSe@CdS, полученными на CdSe-ядрах, не подвергавшихся такой активации.

### **Силоксан(бутиленоксид)уретановые блок-сополимеры. Синтез в массе и свойства**

*Бузин М.И., Макарова Л.И., Васильев В.Г., Филимонова Л.В., Афанасьев Е.С.,  
Никифорова Г.Г., Папков В.С.*  
ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва

Разработан новый способ синтеза силоксан(бутиленоксид)-уретановых блок-сополимеров. Обнаружено увеличение термической стойкости блок-сополимеров при введении силоксанового блока. Найдено, что максимальное удлинение при разрыве достигает 750%, а разрывная прочность 43 МПа.

### **Межмолекулярные водородные связи в реакции алкоголиза хлорангидридов карбоновых кислот алифатическими спиртами**

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

На основе использования метода B3LYP/aug-cc-pVDZ определена роль водородно-связанных комплексов в реакции взаимодействия хлорангидридов карбоновых кислот с алифатическими спиртами.

### **Влияние производного тиазолидин-2,4-диона на мембрану клетки и синтез эргостерола патогенного гриба *Candida albicans***

*Веденкин А.С.<sup>1</sup>, Зленко Д.В.<sup>2</sup>, Левшин И.Б.<sup>1</sup>, Стовбун С.В.<sup>1</sup>*  
1. ИХФ РАН, Москва  
2. МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва

В представленной работе показано, что при выраженной фунгицидной активности 3-этоксикарбонил-5-(4-хлорбензилоиден)тиазолидин-2,4-дион не действует на биосинтез эргостерола и на плазматические мембраны *C. albicans*. Выявлено, что плазмалемма клетки гриба в широком смысле не является его мишенью.

## **Профилактическое защитное действие азотнокислого лантана при бактериальных инфекциях**

*Веденкин А.С.<sup>1</sup>, Калинина Т.С.<sup>2</sup>, Литвин А.А.<sup>1</sup>, Николаева Т.Н.<sup>3</sup>, Стовбун С.В.<sup>1</sup>*

1. ИХФ РАН, Москва
2. Институт фармакологии РАМН, Москва
3. ФГБУ «ФНИЦЭМ им. Н. Ф. Гамалеи», Москва

Показан протекторный эффект азотнокислого лантана при нанесение на кожу и при внутрибрюшинном введение мышам на модели внутривенного заражения *Klebsiella pneumoniae* и модели внутрибрюшного заражения вирулентным штаммом *Shigella flexneri*. Выявлена дозозависимость протекторного действия азотнокислого лантана при внутрибрюшном введении.

## **Роль структурных напряжений при термодеструкции нитроцеллюлозы**

*Стовбун С.В.<sup>1</sup>, Ломакин С.М.<sup>2</sup>, Щеголихин А.И.<sup>2</sup>, Скоблин А.А.<sup>1</sup>,  
Мельников В.П.<sup>1</sup>*

- <sup>1</sup>ИХФ РАН, Москва
- <sup>2</sup>ИБХФ РАН, Москва

Выявлены два механизма потери массы НЦ при нагревании: а) обычная термодеструкция при небольшой скорости нагревания и/или содержании азота; б) термофлуктуационный механизм Журкова деструкции механически напряженных макромолекул НЦ, при большей скорости нагревания и/или содержании азота, ускоряющий деструкцию в ~2000 раз.

## **Кальциевая соль N-(5-гидроксиникотиноил)-L-глутаминовой кислоты изменяет реакцию пирамидных нейронов СА1 области гиппокампа при ортодромной стимуляции в срезах гиппокампа крыс.**

*Стовбун И.С.<sup>1,2</sup>, Мотин В.Г.<sup>3</sup>*

1. ИХФ РАН, Москва
2. ФГБНУ «НИИ фармакологии имени В.В. Закусова», Москва
3. ФГБНУ «НИИНФ имени П.К. Анохина», Москва

При регистрации популяционных спайков в поле СА1 гиппокампа в ответ на стимуляцию коллатералей Шафера на переживающих срезах гиппокампа крыс Вистар установлено, что кальциевая соль N-(5-гидроксиникотиноил)-L-глутаминовой кислоты облегчает синаптическую передачу в системе «коллатерали Шаффера – пирамидные нейроны поля СА1 гиппокампа».

## **Особенности процесса формирования нанокompозитов поли-п-ксилилена и серебра**

*Вдовиченко А.Ю.<sup>1,2</sup>, Сахарутов Д.А.<sup>1</sup>, Завьялов С.А.<sup>1</sup>, Озерин С.А.,  
Аронзон Б.А.<sup>1</sup>, Стрельцов Д.Р.<sup>2,1</sup>, Чвалун С.Н.<sup>1,2</sup>*

1. НИЦ Курчатовский институт, Москва
2. Институт синтетических полимерных материалов РАН, Москва

В работе исследован процесс формирования методом газофазной полимеризации нанокompозитов поли-п-ксилилена и серебра. Методом дифференциальной сканирующей калориметрии были определены термодинамические параметры процесса синтеза, а электрические и структурные свойства имеют перколяционный характер.

## **Большое положительное магнитосопротивление в модифицированном графене в поле до 0.5 Тесла**

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

Путем однократного напуска ацетиленом выращены пленки графена на подслое железа. При последующем удалении железа в водном растворе нитрата железа получены структуры, магнитосопротивление которых достигает значения 70% в поле 0.5 Т при 300 К и имеет квазилинейную зависимость  $MR(H)$  в полях 0.07 - 0.5 Т, что особенно привлекательно для создания магниторезистивных сенсоров.

## **Изменение скорости термической деструкции поликарбонатных пленок в присутствии нанопроволок платины и серебра**

*Волкова Н.Н., Гордон Е.Б., Карабулин А.В., Матюшенко В.И.*  
ИПХФ РАН, г. Черноголовка

Исследована кинетика потери массы при термодеструкции поликарбонатных пленок, содержащих нанопроволоки из Pt и Ag, полученные методом лазерной абляции в сверхтекучем гелии. Показано, что в присутствии нанопроволок скорость разложения поликарбоната при температурах 319 - 327°C увеличивается приблизительно в 2 раза.

## **Широкополосная ИК-фотолюминесценция легированного висмутом иодида $\text{TlCdI}_3$**

*Втюрина Д.Н.<sup>1</sup>, Пимкин Н.А.<sup>2</sup>, Кузнецов М.С.<sup>2</sup>, Лисицкий И.С.<sup>2</sup>, Михалева М.Г.<sup>1</sup>, Иким М.И.<sup>1</sup>, Фаттахова З.Т.<sup>1</sup>, Шашкин Д.П.<sup>1</sup>, Романов А.Н.<sup>1</sup>, Корчак В.Н.<sup>1</sup>*

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

2. ОАО "Гиредмет" ГНЦ РФ, Москва.

Методом Бриджмена–Стокбаргера получены монокристаллические образцы легированного висмутом  $\text{TlCdI}_3$ . Материал обладает широкополосной фотолюминесценцией в ближнем ИК-диапазоне спектра с максимумом интенсивности на длине волны 1175 нм. Показано, что оптический центр в  $\text{TlCdI}_3$  не является катионом одновалентного висмута.

## **Свойства наноразмерных железосодержащих промотированных суспензий в синтезе Фишера-Тропша**

*Вульпе А.И., Дементьева О.С., Куликова М.В., Хаджиев С.Н.*

ИНХС РАН, Москва

Методом термического разложения *in situ* получены наноразмерные железосодержащие суспензии для осуществления синтеза Фишера-Тропша. Показана возможность регулирования селективности процесса в отношении фракционного состава целевых продуктов синтеза путем введения добавок щелочных металлов и оксидных промоторов.

## **Новый $P^*,P^*$ -бидентатный диамидофосфит на основе 1,8-октандиола в $\text{Pd}$ -катализируемых асимметрических реакциях.**

*Гаврилов В.К., Зимарев В.С., Фирсин И.Д.*

РГУ имени С.А. Есенина, г. Рязань

На основе 1,8-октандиола получен лиганд диамидофосфитной природы, располагающий донорными асимметрическими атомами фосфора. Предложенный стереоселектор протестирован в  $\text{Pd}$ -катализируемых реакциях с достижением высоких энантиомерных избытков (до 96 % *ee*).

## **Синтез и фотохимические свойства бифотохромной диады на основе 1-(хинолил-2)-2-(пиренил-1)этилена**

*Будыка М.Ф.<sup>1</sup>, Поташова Н.И.<sup>1</sup>, Гавришова Т.Н.<sup>1</sup>, Гринева И.А.<sup>1,2</sup>*

1. ИПХФ РАН, Черногловка

## 2. МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва

Синтезирована бифотохромная диада на основе 1-(хинолил-2)-2-(пиренил-1)этилена и исследованы ее спектральные и фотохимические свойства. Установлено, что при облучении мягким УФ или видимым светом диада участвует в двух конкурентных реакциях: фотоизомеризации и [2+2] фотоциклоприсоединения.

### **Адсорбция бутен-2-аля на химически модифицированной поверхности кластера Pt<sub>25</sub>. Квантово-химическое исследование**

*Гаджиев О.Б.<sup>1,2</sup>, Игнатов С.К.<sup>1</sup>, Масунов А.Э.<sup>3</sup>*

1. ННГУ, г. Нижний Новгород
2. ИХВВ им. Г.Г. Девятовых РАН, г. Нижний Новгород
3. University of Central Florida, Orlando, Florida, United States

Обнаружены различные координационные моды адсорбции одной молекулы бутен-2-аля, влияние различных спиновых состояний кластера Pt<sub>25</sub>, а также взаимное влияние группы BuS и 1,2,3 молекул адсорбата. Пространственно затрудненное окружение является необходимой причиной роста селективности каталитического гидрирования.

### **Влияние фотоактивации и толщины сульфидной оболочки на мерцание флюоресценции коллоидных квантовых точек**

*Бричкин С.Б.<sup>1</sup>, Гак В.Ю.<sup>1</sup>, Волкова Е.Е.<sup>2</sup>, Разумов В.Ф.<sup>1</sup>, Спириин М.Г.<sup>1</sup>, Товстун С.А.<sup>1</sup>*

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

Синтезированы коллоидные квантовые точки (ККТ) CdSe@CdS. Записаны кинетические кривые затухания и рассчитаны распределения времен жизни их люминесценции. Рост толщины полупроводниковой оболочки ведёт к эффективному подавлению мерцания флюоресценции, также как и фотоактивация ядер. Аналогичные результаты получены для ККТ InP@ZnS.

### **Структура ориентированных материалов, полученных твердофазным формованием реакторных порошков СВМПЭ**

*Голубев Е.К.<sup>1</sup>, Озерин А.Н.<sup>1</sup>, Кечекьян А.С.<sup>1</sup>, Куркин Т.С.<sup>1</sup>, Аулов В.А.<sup>1</sup>, Кучкина И.О.<sup>1</sup>, Иванчев С.С.<sup>2</sup>, Иванчева Н.И.<sup>2</sup>, Мартьянов А.М.<sup>3</sup>*

1. ИСПМ РАН, Москва

2. С. Петербургский филиал ИК СО РАН
3. ОАО “Красноярская химическая компания”

Данная работа посвящена сравнительному изучению разницы механических характеристик пленочных нитей из сверхвысокомолекулярного полиэтилена, полученных методом твердофазного формования и гель-методом с точки зрения распределения кристаллитов по размеру.

### **Процессы тушения орбитально вырожденных ридберговских частиц на молекулах кислорода**

*Борчевкина О.П.<sup>1</sup>, Бессараб Ф.С.<sup>2</sup>, Голубков Г.В.<sup>3</sup>,  
Голубков М.Г.<sup>3</sup>, Карпов И.В.<sup>2</sup>*

1. Балтийский федеральный университет им. И.Канта, Калининград
2. КФ ИЗМИРАН, Калининград
3. Институт химической физики им. Н.Н.Семенова РАН, Москва

Разработана теория ударного тушения ридберговских квазимолекул  $A^{**}O_2$  по гарпунному механизму через ионную конфигурацию  $A^+O_2^-$ , которая основана на использовании метода оптического потенциала и позволяет последовательно учитывать множество неадиабатических переходов во все возможные промежуточные состояния системы. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №16-05-00052).

### **Диссоциативная рекомбинация медленных электронов и молекулярных ионов азота**

*Озеров Г.К.<sup>1</sup>, Куверова В.В.<sup>1</sup>, Адамсон С.О.<sup>2</sup>, Голубков Г.В.<sup>1</sup>, Голубков М.Г.<sup>1</sup>,  
Юрова И.Ю.<sup>3</sup>*

1. Институт химической физики им. Н.Н.Семенова РАН, Москва
2. Химический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва
3. Физический факультет СПбГУ, Санкт-Петербург

На основании новых данных о потенциальных кривых и матричных элементах неадиабатического взаимодействия низших синглетных состояний молекулы  $N_2$  рассчитаны парциальные сечения и константы скорости реакции диссоциативной рекомбинации медленных электронов и молекулярных ионов азота. Расчет проведен в рамках теории многоканального квантового дефекта. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №15-03-03396).



## **Молекулярные свойства и первичные механизмы разложения взрывчатых перхлоратов тетразолатоамминокобальта(III)**

*Голубев В.К.*<sup>1,2</sup>

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

Проведено расчетное изучение свойств молекулярных комплексов шести взрывчатых перхлоратов, наиболее известным из которых является перхлорат цис-бис-(5-нитротетразолато-N<sup>2</sup>) тетраамминокобальта (III) (вещество BNCP). Определены молекулярные свойства, механизмы разложения, уравнения состояния продуктов детонации.

## **Наноструктурированные гетерослоистые соединения дисульфида молибдена с аминопроизводными нафталина**

*Голубь А.С.*<sup>1</sup>, *Лененко Н.Д.*<sup>1</sup>, *Головешкин А.С.*<sup>1</sup>, *Ушаков И.Е.*<sup>1</sup>,  
*Корлюков А.А.*<sup>1</sup>, *Зайковский В.И.*<sup>2,3</sup>, *Бушмаринов*<sup>1</sup>

1. ИНЭОС РАН, г. Москва
2. ИК СО РАН, г. Новосибирск
3. НГУ, г. Новосибирск

Обсуждаются закономерности самосборки слоистых нанокристаллов с участием монослоев MoS<sub>2</sub> и ряда аминопроизводных нафталина, которые могут формировать в данных системах гостевые слои различного строения.

## **Новый метод расчета тонкостенных магнитных экранов на основе материала АМАГ-172**

*Гребенщиков Ю.Б.*<sup>1,3</sup>, *Бузин В.Б.*<sup>2</sup>, *Гудошников С.А.*<sup>1,2</sup>, *Любимов Б.Я.*<sup>1,2</sup>

- 1) НИТУ «МИСиС», Москва
- 2) ИЗМИРАН, Троицк, Москва
- 3) Финансовый университет при правительстве России, Москва

В данной работе предлагается сравнительно простой подход к расчету коэффициента ослабления поля длинным цилиндрическим экраном. В качестве основной характеристики экранов заданной геометрии предлагается набор гистерезисных кривых  $H_{ex}(H_{in})$ , найденных в результате измерений поля в определенной точке экрана, выбранного в качестве опорного.

## **Фотофизические и фотохимические процессы гибридной ассоциации коллоидных квантовых точек $Ag_2S$ с молекулами органических красителей**

*Гревцева И.Г., Овчинников О.В., Кондратенко Т.С., Смирнов М.С.,  
Перепелица А.С.*

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», г. Воронеж

Обнаружено усиление и блокировка ИК люминесценции коллоидных квантовых точек (КТ)  $Ag_2S$  в случае их сопряжения с молекулами органических красителей. Наблюдаемые эффекты зависят от энергетических характеристик красителей. Деградация интенсивности люминесценции в зависимости от времени воздействия излучения, определяется фотохимическими процессами компонентов ассоциата.

## **Механизмы межмолекулярных взаимодействий, обеспечивающих образование гибридных ассоциатов коллоидных КТ $Ag_2S$ с молекулами МВ**

*Кондратенко Т.С.<sup>1</sup>, Гревцева И.Г.<sup>1</sup>, Овчинников О.В.<sup>1</sup>, Смирнов М.С.<sup>1</sup>,  
Перепелица А.С.<sup>1</sup>, Родкина Н.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», г. Воронеж

<sup>2</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва

По ИК спектрам установлен диполь-дипольный характер взаимодействий, обеспечивающих образование гибридных ассоциатов коллоидных квантовых точек (КТ)  $Ag_2S$ , пассивированных тиогликолевой кислотой с молекулами метиленового голубого (МВ). Гибридная ассоциация КТ  $Ag_2S$  в желатине и красителя обеспечивается водородными связями.

## **Физико-химические свойства покрытий образованных золотыми и никелевыми наночастицами**

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

На золотых наночастицах в результате их последовательной экспозиции в  $H_2$  и  $CO$  наблюдалось формирование формила (НСО), который в результате взаимодействия на поверхности золота с кислородом окисляется с образованием  $CO_2$  и воды. Водород и  $CO$  восстанавливают окисленные наночастицы никеля, а экспозиция в  $O_2$  приводит к их повторному окислению.

## **Взаимодействие золото-никелевых наноструктурированных катализаторов с CO, O<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>**

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

На золото-никелевом покрытии, состоящем из гомо- и гетерогенных кластеров, обнаружено, что в результате последовательной экспозиции образца в H<sub>2</sub> и CO образуются формил (НСО) и вода. В результате взаимодействия с кислородом формил окисляется с образованием диоксида углерода и также воды, которые преимущественно десорбируются в газовую фазу.

## **Влияние режима спекания композитов Ca-ZrO<sub>2</sub> – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> на их механические свойства**

*Гусева Д.Г., Дмитриевский А.А., Жигачев А.О., Тюрин А.И.*  
ТГУ имени Г.Р. Державина, Тамбов

В работе исследованы механические свойства наноструктурированных композитов Ca-ZrO<sub>2</sub> – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, отличающихся условиями (температурами) спекания. Установлены температуры  $T_1 = 1300$  °С и  $T_2 = 1200$  °С двухстадийного спекания, обеспечивающие оптимальное соотношение твердости и вязкости разрушения композитов.

## **Изменение маршрутов гидрирования CO в синтезе Фишера-Тропша путем промотирования наноразмерных железосодержащих систем**

*Дементьева О.С., Чудакова М.В., Норко С.И., Хаджиев С.Н.*  
ИНХС РАН, Москва

Показана возможность управления селективностью наноразмерных железосодержащих суспендированных катализаторов в отношении образования метанола и спиртов C<sub>2+</sub> в реакции синтеза Фишера-Тропша путем введения в их состав щелочных металлов и ZrO<sub>2</sub> в качестве модифицирующих добавок.

## **Влияние состава цеолитного катализатора на распределение продуктов каталитической деполимеризации полистирола в углеводородной среде**

*Дементьев К.И., Енгальчева И.А.*  
ИНХС РАН, Москва

Проведено исследование влияния состава катализатора деполимеризации полистирола на распределение продуктов деполимеризации. Выявлена

существенная корреляция между соотношением цеолитов с разным размером пор в составе катализатора и соотношением бензол/этилбензол в продуктах деполимеризации.

### **Композиционные материалы на основе полилактида и фосфатов кальция**

*Демина В.А.<sup>1</sup>, Седуш Н.Г.<sup>1</sup>, Чвалун С.Н.<sup>1,2</sup>*

1 - НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва

2 – ИСПМ РАН, г. Москва

В данной работе разработан метод получения композиционного материала на основе полилактида и фосфатов кальция для травматологии и ортопедии. Проведено комплексное исследование полученного материала различными методами. Изготовлены крепежные изделия. Костные блоки животных с имплантированными на 6 месяцев винтами были изучены методами компьютерной и микротомографии.

### **Применение методов квантовой химии (КХ) в микротeorии структурных фазовых переходов (СФП) для Н-связанных сегнетоэлектриков (СЭ) и родственных систем**

*Михайлова Т.Ю., Долин С.П., Бреславская Н.Н.*

ИОНХ РАН, Москва

Обсужден вопрос о применимости различных КХ методов в микротeorии СФП для определения параметров псевдоспинового гамильтониана изинговского типа.

### **Атомная и электронная структура кластеров $Au_xN_y$**

*Дохликова Н.В., Гришин М.В., Колченко Н.Н., Шуб Б.Р.*

ИХФ РАН, Москва

В приближении ТФП исследованы атомное и электронное строения кластера  $Au_xN_y$  и влияние кластера  $C_{54}$  на них. Взаимодействие с водородом вызывает смещение «центра тяжести» плотности состояний кластера золота от уровня Ферми в сторону отрицательных значений энергии, что коррелирует с тенденцией уменьшения величины энергии связи Au-H. Изменения в пространственном и энергетическом распределении электронов в золоте в системе  $Au_{13}C_{54}$  влияют на его свойства разнонаправлено, однако в данном случае определяются в большей степени перестройкой энергетической структуры, чем переносом заряда.

## Оптимальное управление замкнутым периодическим реактором

*Дубовицкий В.А., Гак Л.Н., Самойленко Н.Г.*  
ИПХФ РАН, г. Черноголовка

Рассмотрена математическая модель замкнутого периодического реактора с регулируемой подачей реагентов и экзотермической многостадийной реакцией получения продукта. Методами теории оптимального управления решаются задачи максимизации производительности реактора с учётом ограничений на температуру и устойчивость процесса.

## Переработка растительных масел в алканы и линейные альфа-олефины в присутствии оригинального Pt-Sn/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> катализатора

*Жарова П.А.<sup>1</sup>, Чистяков А.В.<sup>1,2</sup>, Шаповалов С.С.<sup>3</sup>, Пасынский А.А.<sup>3</sup>,  
Цодиков М.В.<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup> ИНХС РАН, Москва

<sup>2</sup> ИХФ РАН, Москва

<sup>3</sup> ИОНХ РАН, Москва

Изучены закономерности прямой гидродеоксигенации растительных масел, в т.ч. масла микроводорослей, свободных жирных кислот и модельных сложных эфиров в алканы и линейные  $\alpha$ -олефины в присутствии Pt-Sn/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> катализатора на основе биметаллического органического комплекса, содержащего связи металл-металл. Обнаружены подходы к регулированию селективности образования олефинов.

## Каталитические системы на основе хиральных лигандов фосфитной природы с фрагментом (R,R)-TADDOL

*Жеглов С.В., Гаврилов К.Н., Новиков И.М., Гаврилов В.К., Максимова М.Г.*  
ФГБОУ ВО «РГУ имени С.А. Есенина», г. Рязань

Палладиевые каталитические системы на основе (R,R)-TADDOL и (S<sub>a</sub>)- или (R<sub>a</sub>)-N-Bn-NOBIN обеспечили высокие результаты в модельном процессе асимметрического аллильного замещения.

## Влияние полимерной матрицы на формирование и стабилизацию аномальных структур наночастиц в тонкопленочных нанокompозитах

*Завьялов С.А.<sup>1</sup>, Вдовиченко А.Ю.<sup>1,2</sup>, Несмелов А.А.<sup>1</sup>, Зубавичус Я.В.<sup>1</sup>,  
Стрельцов Д.Р.<sup>2,1</sup>, Озерин С.А., Чвалун С.Н.<sup>1,2</sup>*

1. НИЦ Курчатовский институт, Москва

## 2. Институт синтетических полимерных материалов РАН, Москва

Проведены комплексные исследования с помощью рентгеновских методик на базе синхротронного излучения (порошковой дифрактометрии и рентгеноабсорбционной спектроскопии EXAFS/XANES), атомно-силовой микроскопии, оптической спектроскопии, электронной микроскопии и исследования электрофизических параметров тонкопленочных композитов на основе матрицы из поли-пара-ксилилена (ППК) и наночастиц никеля, железа, титана, серы, халькогенидов свинца, кадмия, цинка. Показано, что вследствие взаимодействия матрицы и наполнителя в большинстве этих материалов стабилизируются деформированные структуры наночастиц.

### **Влияние толщины и концентрации пленок полимерных нанокомпозитов ППК-CdS на их оптические свойства и размер наночастиц**

*Иванова О.П.<sup>1</sup>, Криничная Е.П.<sup>1</sup>, Завьялов С.А.<sup>2</sup>, Журавлева Т.С.<sup>1</sup>*

1. ИБХФ РАН, Москва
2. НИЦ “Курчатовский институт”, Москва

Исследованы изменения оптических спектров поглощения пленок полимерных нанокомпозитов ППК-CdS разной толщины в зависимости от концентрации наполнителя и проведены оценки размеров наночастиц CdS. Получена корреляция оптических свойств с размерами наночастиц наполнителя.

### **Распределение по размерам полимерных глобул в пленках нанокомпозитов ППК-CdS разной толщины в зависимости от концентрации наполнителя**

*Иванова О.П.<sup>1</sup>, Криничная Е.П.<sup>1</sup>, Завьялов С.А.<sup>2</sup>, Журавлева Т.С.<sup>1</sup>*

1. ИБХФ РАН, Москва
2. НИЦ “Курчатовский институт”, Москва

Исследованы морфологические особенности (метод АСМ) пленок нанокомпозитов ППК-CdS разной толщины в зависимости от концентрации наполнителя. Выявлены изменения в параметрах поверхности, свидетельствующие о перестройке полимерной матрицы как в ряду концентраций, так и по толщине.

### **Электропроводящие свойства твердых растворов на основе диоксида церия**

*Загайнов И.В.*

ИМЕТ РАН, Москва

Изучено влияние состава исходных нанокристаллических порошков  $Gd_xTi_yZr_zCe_{1-x-y-z}O_2$  ( $x+y+z \leq 0,3$ ) и  $Gd_xBi_{0,2-x}Ce_{0,8}O_2$  на электропроводность

керамики, спеченной при температуре 1300°C и 1000°C на воздухе, соответственно. Фазовый состав и микроструктура образцов исследовали методами РФА и СЭМ. Электропроводность материалов измеряли в области температур 400-1000°C на воздухе.

### **Гидрогели на основе биоразлагаемого сополимера молочной кислоты и этиленгликоля**

*Загоскин Ю.Д.<sup>1</sup>, Григорьев Т.Е.<sup>1,2</sup>, Бакиров А.В.<sup>1,3</sup>, Богданова О.И.<sup>1,3</sup>,  
Чвалун С.Н.<sup>1,3</sup>*

1. НИЦ «Курчатовский институт», Москва
2. ИНЭОС РАН, Москва
3. ИСПМ им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва

В данной работе была показана зависимость строения тройных блок-сополимеров молочной кислоты и этиленгликоля на физико-механические характеристики гидрогелей. Была исследована структура гидрогелей методом рассеяния рентгеновских лучей. На основе полученных данных была охарактеризована надмолекулярная структура.

### **Время вакансионной релаксации плотности в каплях металлов**

*Зайцева Е.С., Воронцов П.С., Гвоздева Е.Е., Товбин Ю.К.*  
ГНЦ РФ НИФХИ им. Л.Я.Карпова, Москва

Разработан комплекс программ для оценки времени релаксации плотности капель металлов с ГЦК решеткой Ag, Au, Al, Cu, Ni и Pb радиусом от 10 нм до 1 см, полученных при высоких температурах с последующей закалкой до низких температур, в широком диапазоне температур.

### **Кинетические особенности трансформации опасных химических веществ в природных водах их формы и пути миграции**

*Зайцева Н.И.<sup>1</sup>, Вичутинская Е.В.<sup>1</sup>, Скурлатов Ю.И.<sup>1</sup>, Штамм Е.В.<sup>2</sup>*  
1.ИХФ РАН, Москва  
2.ИБХФ РАН, Москва

Проведен анализ существующих представлений об опасных химических веществах (ОХВ) применительно к проблеме химической безопасности водных объектов окружающей среды. Рассмотрены пути миграции и трансформации ОХВ в природной водной среде; химико-биологические процессы, оказывающие наибольшее влияние на биологическую

полноценность природной водной среды, в частности, процессы с участием промежуточных продуктов восстановления кислорода; формы нахождения и реакционная способность ионов металлов переменной валентности.

### **Роль металлов переменной валентности в окислительно-восстановительных и свободно-радикальных процессах, протекающих в природных водах.**

*Зайцева Н.И.<sup>1</sup>, Вичутинская Е.В.<sup>1</sup>, Швыдкий В.О.<sup>2</sup>, Скурлатов Ю.И.<sup>1</sup>*

1. ИХФ РАН, г. Москва

2. ИБХФ РАН, г. Москва

Представлены свидетельства возникновения экологически опасных явлений при загрязнении водных объектов водорастворимыми соединениями восстановленной серы, влияющими на внутриводоемные процессы с участием пероксида водорода. Обоснована роль *моно*-сульфидных комплексов Fe(II) и *моно*-тиолатных комплексов Cu(I) состава 1:1 в формировании *квази*-восстановительного состояния природной водной среды токсичного в отношении аэробных организмов с интенсивным водообменном, при котором ионы меди переходят в биологически недоступную форму.

### **Изучение термического разложения 2-(динитрометил)-1,3-диазаацетопентана методами ДСК и ТГ**

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

ИПХФ РАН, г. Черноголовка

Методом ДСК и ДТГ изучено термическое разложение энергоемкого соединения 2-(динитрометил)-1,3-диазаацетопентана (ДНДП) в диапазоне температур 30–350°C. Определены: тепловой эффект разложения в изученном температурном диапазоне и активационные параметры этого процесса.

### **Нелинейные абсорбционные свойства водных растворов красителей**

*Звягин А.И., Кондратенко Т.С., Перепелица А.С., Винокур Я.А.*

ФГБОУ ВО “Воронежский государственный университет”, Воронеж

С помощью метода Z сканирования в варианте с открытой апертурой под действием лазерных импульсов 532 нм с длительностью 10 нс были исследованы нелинейные свойства водных растворов красителей (эритрозин, тионин). Для эритрозина свойственно насыщение поглощения, для тионина – двухфотонное поглощение и насыщение поглощения.



## **Термостимулированная люминесценция в коллоидных квантовых точках Ag<sub>2</sub>S**

*Перепелица А.С., Овчинников О.В., Смирнов М.С., Звягин А.И.,  
Леонова Л.Ю., Новикова С.Н.*

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», Воронеж

Методом термостимулированной люминесценции установлены две группы локализованных состояний с глубинами  $0.15 \pm 0.02$  эВ и  $0.20 \pm 0.02$  эВ в ансамблях коллоидных квантовых точек Ag<sub>2</sub>S средним размером от  $2.2 \pm 0.5$  нм, обладающих рекомбинационной люминесценцией с максимумом  $1200 \pm 1$  нм при температуре 300 К.

## **Зависимость морфологии поверхности пленок твердых растворов системы CdS-ZnS от концентрации ионов Zn<sup>2+</sup>**

*Звягина О.В., Нитута А.Н., Самофалова Т.В.*

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», Воронеж

Была изучена морфология поверхности непрерывного ряда на основе твердых растворов CdS-ZnS. В данной системе выявлены зависимости средней шероховатости и средней квадратичной шероховатости в зависимости от содержания ионов цинка. Для данной системы характерно наименьшие значения для промежуточного твердого раствора Cd<sub>0.5</sub>Zn<sub>0.5</sub>S.

## **Раскручивание наночастиц лимитирует скорость нитрования целлюлозы**

*Зленко Д.В.<sup>1,2</sup>, Стовбун С.В.<sup>1</sup>*

1. Институт химической физики имени Н.Н. Семёнова РАН. Москва.
2. Биологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова. Москва.

Использование представлений о молекулярной хиральности и суперспирализации позволяет описать процесс нитрования целлюлозы на молекулярном уровне. Замедление реакции нитрования происходит из-за Борновского барьера для иона нитрония на границе наночастиц, а скорость процесса лимитируется раскручиванием волокон, которое и открывает доступ нитрующим агентам внутрь наночастиц.

## **Молекулярная структура растворов тартрата натрия**

*Зленко Д.В.<sup>1,2</sup>, Стовбун С.В.<sup>1</sup>*

1. Институт химической физики имени Н.Н. Семёнова РАН. Москва.
2. Биологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова. Москва.

Методами молекулярной динамики были смоделированы раствор тартрата натрия. Анализ РФР концентрированных растворов позволил установить, что в

процессе образования осадка ионы тартрата могут взаимодействовать непосредственно друг с другом, или через молекулу воды. В агрегатах наблюдаются две независимые кубические кристаллические решётки, образованные молекулами с разными типами контактов друг с другом.

### **Стандартные энтальпии образования *N*-(2,2-бис(метокси-*NNO*-азокси)этил)пиразола, его 3- и 4-нитропроизводных**

*Зюзин И.Н.<sup>1</sup>, Казаков А.И.<sup>1</sup>, Курочкина Л.С.<sup>1</sup>, Лемперт Д.Б.<sup>1</sup>, Далингер И.Л.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ИПХФ РАН, Черноголовка,

<sup>2</sup>ИПХФ РАН, Москва

Стандартные энтальпии образования 1-(2,2-бис(метокси-*NNO*-азокси)этил)пиразола, его 3- и 4-нитропроизводных определены на основании измеренных энтальпий сгорания в кислороде. Выполнены расчеты энергетической эффективности этих пиразолов в качестве потенциальных компонентов энергетических материалов.

### **К структуре 3D-упорядоченных нанокомпозитов на основе опаловых матриц. Малоугловое рассеяние.**

*Ивичева С.Н., Амарантов С.В., Каргин Ю.Ф.*

ИМЕТ РАН, Москва

ИК РАН, Москва

Анализ данных МУР опалоподобных композитов, как многоуровневых систем, был проведен на основе моделирования рассеивающей структуры, а определение параметров распределения рассеивающих неоднородностей – с помощью сравнения модельной кривой рассеяния с экспериментальными результатами.

### **Получение трехмерных нанокомпозитов на основе опаловых матриц различного функционального назначения при обработке спиртами в сверхкритических условиях**

*Ивичева С.Н., Каргин Ю.Ф.*

ИМЕТ РАН, Москва

Изучены продукты окислительно-восстановительных реакций при получении нанокомпозитов на основе опаловых матриц(ОМ) и металлических наночастиц в сверхкритических условиях изопропилового спирта. Доказано, что восстановителем высокодисперсных солей и оксидов металлов, введенных в мезопористые ОМ, является водород, образующийся в результате каталитического дегидрирования изопропилового спирта при СК условиях эксперимента. Показано использование СК-спиртов для синтеза аэрогелей в пустотах ОМ.

## **Влияние калия на процесс приготовления Fe/сибунит катализаторов синтеза Фишера-Тропша**

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

В данной работе был исследован процесс приготовления железных катализаторов на основе сибунита магнитометрическим методом *in situ*, EDS, XRD, ТЕМ, DSC-TG. Показано, что добавка калия заметно увеличивает температуру разложения нитрата железа и восстановления  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  до  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ . Установлено, что в процессе разложения преимущественно образуется магнетит  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , а его доля увеличивается с увеличением содержания калия.

### **«Спектральные особенности излучения метано-кислородных пламён в условиях проникновения через препятствия. Возможности метода 4D спектроскопии»**

*Виноградов А.Н.<sup>1</sup>, Калинин А.П.<sup>2</sup>, Родионов А.И.<sup>1</sup>, Родионов И.Д.<sup>3</sup>, Родионова И.П.<sup>3</sup>, Рубцов Н.М.<sup>4</sup>, Трошин К.Я.<sup>3</sup>, Цветков Г.И.<sup>4</sup>, Черныш В.И.<sup>4</sup>*

1. ЗАО «НТЦ «Реагент», г. Москва

2. ИПМех РАН, г. Москва

3. ИХФ РАН, г. Москва

4. ИСМАН РАН, Московская область, г. Черноголовка

Демонстрируется возможности изучения спектральных особенностей излучения метано-кислородных пламён в условиях проникновения через препятствия при одновременном использовании метода скоростной съемки и гиперспектральных измерений (4D спектроскопии).

### **Экспресс метод оценки грибостойкости полимерных материалов.**

*Калинина И.Г., Гумаргалиева К.З., Казарин В.В., Семенов С.А.*  
Институт химической физики им. Н.Н. Семенова, РАН, г. Москва

Установлена корреляция адгезионных характеристик микроскопического гриба *Aspergillus niger* и интенсивности его роста на различных полимерных материалах. Получены аналитические модели, связывающие эти характеристики и позволяющие оценить грибостойкость материалов по результатам экспериментального определения адгезии спор.

## **Спектры ИК НПВО и строение комплекса $\text{H}^+(\text{DMSO})_2$ в Нафине**

*Карелин А.И., Каюмов Р.Р., Сангинов Е.А., Добровольский Ю.А.*  
ИПХФ РАН, Черноголовка

Для мембран Нафина, пластифицированных диметилсульфоксидом, приведены данные спектроскопии ИК НПВО, свидетельствующие о нарушении симметрии комплекса  $\text{H}^+(\text{DMSO})_2$  в электрическом поле аниона  $-\text{SO}_3^-$ .

## **Сдвиг зон на гетерогранице полупроводниковых соединений $\text{A}_3\text{B}_5$ .**

*Карпушин А.А.*  
Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова, Новосибирск.

Найдена локальная электронная структура и сдвиг краев зон на гетерогранице полупроводников  $\text{A}_3\text{B}_5$ . Показано, что локальная электронная структура и сдвиг краев зон на гетерогранице  $\text{A}_3\text{B}_5$  зависят как от объемной электронной структуры контактирующих материалов, так и от переноса заряда из объема полупроводников на гетерограницу.

## **Радиационно-химический синтез теломеров тетрафторэтилена в хлорсиланах и их применение**

*Кирюхин Д.П., Кичигина Г.А., Куц П.П.*  
ИПХФ РАН, Черноголовка

Проведен радиационно-химический синтез теломеров тетрафторэтилена в растворах диметилдихлорсилана и триметилхлорсилана. Исследованы кинетика и механизм процесса и свойства продуктов реакции. Продемонстрирована возможность использования синтезированных теломеров для получения фторсодержащих стеклопластиков.

## **Лёгкое протекание «запрещённой» правилами Вудворда-Хоффмана термической реакции $[2\pi+2\pi]$ -циклоприсоединения 4-фенил-1,2,4-тризолин-3,5-диона с адамантилиден-адамантаном**

*Киселёв В.Д., Корнилов Д.А., Аникин О.В.*  
К(П)ФУ, Казань

Обнаружено резкое различие во влиянии полярности растворителей на скорость реакции  $[2\pi+2\pi]$ -циклоприсоединения 4-фенил-1,2,4-тризолин-3,5-

диона (ФТАД) с адамантилиден-адамтаном ( $A_d=A_d$ ) по сравнению с реакцией  $[2\pi+2\pi]$ -циклоприсоединения тетрацианоэтилена (ТЦЭ) с алкилвиниловыми эфирами.

### **Конверсия пиролизных смол, образующихся при сверхadiaбатической газификации древесины, в горючий газ**

*Кислов В.М., Глазов С.В., Гончаров Е.А., Цветкова Ю.Ю., Пилипенко Е.Н.,  
Салганская М.В.*

ИПХФ РАН, г. Черноголовка

Проведены эксперименты по окислительной конверсии продуктов газификации древесины для освобождения газа от пиролизных смол без потери их энергетической ценности. Установлено, что при конверсии продуктов газификации древесины можно увеличить теплоту сгорания газа до 4.1-4.3 МДж/м<sup>3</sup>. Степень конверсии смол в экспериментах составляла 77-80% и выше. Химический КПД газификации в этих условиях составлял 55-60%.

### **Высокотемпературная рентгенография карбида бора: исследование изменений структурных характеристик**

*Ковалев И.Д., Коновалихин С.В., Пономарев В.И., Мингазов А.И.*  
ИСМАН, Черноголовка

Экспериментально подтверждено наличие фазового перехода у карбида бора при температуре 710-720 К. Установлено, что фазовый переход является обратимым. Показано, что фазовый переход сопровождается изменением коэффициента теплового расширения карбида бора. Впервые выявлена анизотропия КТР кристаллов карбида бора состава  $B_{13}C_2$ .

### **Сенсоры с высокой чувствительностью детектирования паров толуола на основе фотонных кристаллов**

*Козлов А.А., Абдуллаев С.Д., Аксенов А.С., Флид В.Р.*  
Московский технологический университет (ИТХТ), г. Москва

Показано снижение порога обнаружения детектируемого вещества (толуола) в газовой фазе в присутствии неполярного углеводорода (н-октана) по спектральному сдвигу в фотонном кристалле.

## **Описание фотоэлектронных процессов на границе «полиэлектролит - полупроводниковая подложка» при фото- и электростимуляции адсорбции полиэлектролитов**

*Козловский А.В., Стецюра С.В.*

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

Показано, что фотостимулированная адсорбция приводит к изменениям толщины и шероховатости органического покрытия до 30%, а дополнительное приложение электрического поля перпендикулярно к подложке Si может усилить или ослабить этот эффект. Результаты объяснены фотоэлектронными процессами в Si и на границе раздела.

## **Описание процессов токопереноса на границе структур «органическое покрытие - полупроводниковая подложка», полученных при фотостимулированной адсорбции**

*Козловский А.В., Маляр И.В., Стецюра С.В.*

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

После нанесения полиэтиленimina на Si, работа выхода из Si при его освещении уменьшается вне зависимости от типа его проводимости, но большие по модулю изменения при освещении наблюдаются у структур на основе p-Si. Эффект объясняется перезарядкой поверхностных электронных состояний и воздействием ПЭИ на величину области пространственного заряда в Si.

## **Структурные аспекты взаимодействия водорода со сплавами Pd-Ag и Pd-In-Ru.**

*Вяткин А.Ф., Волков В.Т., Колчина А.С.*

ИПТМ РАН, г.Черноголовка

В данной работе проведено исследование кинетики взаимодействия водорода с относительно толстыми (10 - 45 мкм) пленками сплавов Pd-Ag и Pd-In-Ru высокой степени чистоты и произведенных методами прокатки с высокими степенями деформации, при комнатной температуре с использованием метода измерения электрического сопротивления пленок.

## **Влияние электрического поля на проводимость графеновых флейков с примесями**

*Конобеева Н.Н.<sup>1</sup>, Скворцов Д.С.<sup>1</sup>, Белоненко М.Б.<sup>1,2</sup>*

1. Волгоградский государственный университет, Волгоград
2. Волгоградский институт бизнеса, Волгоград

На основании прыжкового гамильтониана для электронов графена с помощью прямой его диагонализации была получена плотность состояний графеновых флейков. На ее основе был вычислен туннельный ток контактов флейков с другими материалами. Изучено влияние постоянного электрического поля на туннельный ток для разных размеров флейков.

## **Влияние многоуровневых примесей на динамику двумерных предельно коротких оптических импульсов в германене**

*Конобеева Н.Н.<sup>1</sup>, Скворцов Д.С.<sup>1</sup>, Белоненко М.Б.<sup>1,2</sup>*

1. Волгоградский государственный университет, Волгоград
2. Волгоградский институт бизнеса, Волгоград

Рассмотрены уравнения Максвелла для электромагнитного поля, распространяющегося в германене с многоуровневыми примесями. Получено эффективное уравнение на вектор-потенциал электромагнитного поля, которое было решено численно. Выявлена зависимость формы импульса от параметров энергетического спектра примесей.

## **Влияние гидростатического давления, температуры и среды на скорость реакции Дильса-Альдера между 9,10-дигидрокси-метилантраценом и малеиновым ангидридом**

*Корнилов Д.А., Киселёв В.Д., Аникин О.В.*  
К(П)ФУ, г. Казань

Нами было установлено, что для замещенных антраценов скорость реакции определяется главным образом различием в энтальпии активации и сильно зависит от природы заместителей. Это согласуется с заключением о том, что значения объема активации лучше коррелируют со значениями энтропии, чем энтальпии активации.

## **Основные режимы решеточной модели обратимого изменения формы островка нанесенного катализатора в условиях химической реакции**

*Коробов А.И.*

Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина, Харьков

Предложена и изучена кинетическим методом Монте Карло предельно упрощенная решеточная модель, демонстрирующая несколько режимов изменения формы островка нанесенного катализатора. Два основных предельных случая – стационарное и хаотическое поведение. Первое предпочтительнее: частые движения атомов снижают эффективность.

## **Линейные зависимости скейлинговых характеристик двумерных разбиений Пуассона-Вороного на квадратных решетках**

*Коробов А.И.*

Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина

Обсуждаются линейные зависимости скейлинговых характеристик двумерных дискретных случайных мозаик различной плотности с метрикой  $\text{dist} = |\Delta x| + |\Delta y|$ , построенных на квадратных решетках непосредственно путем выращивания зародышей. Такие мозаики представляют интерес, когда нужно включить в рассмотрение кристаллическую структуру подложки.

## **Потенциальные кривые синглетных ридберговских и диссоциативных состояний молекулы $N_2$**

*Адамсон С.О.<sup>1</sup>, Озеров Г.К.<sup>2</sup>, Куверова В.В.<sup>2</sup>, Голубков Г.В.<sup>2</sup>, Голубков М.Г.<sup>2</sup>, Юрова И.Ю.<sup>3</sup>*

1. Химический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва
2. Институт химической физики им. Н.Н.Семенова РАН, Москва
3. Физический факультет СПбГУ, Санкт-Петербург

Методом конфигурационного взаимодействия с набором исходных конфигураций (сMRCI) рассчитаны адиабатические потенциальные кривые синглетных ридберговских и диссоциативных состояний молекулы  $N_2$ . Проведено сравнение с результатами других расчетов и экспериментальными данными. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №15-03-03396).



## **Низкотемпературные реакции обмена с участием O, N, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> и ридберговских частиц в орбитально вырожденных состояниях**

*Куверова В.В., Малышев Н.С., Озеров Г.К., Голубков Г.В., Голубков М.Г.*  
Институт химической физики им. Н.Н.Семенова РАН, Москва

Проведен анализ возможных механизмов реакций обмена и пенниговской ионизации с участием орбитально вырожденных ридберговских атомов и молекул и основных компонент D слоя атмосферы. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №16-05-00052).

## **Электрореологические жидкости наполненные нанотрубками галлуазита**

*Кузнецов Н.М.<sup>1</sup>, Белоусов С.И.<sup>1,2</sup>, Чвалун С.Н.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт», Москва

<sup>2</sup>НИФХИ им. Л. Я. Карпова, Москва

Исследованы электрореологические жидкости (ЭРЖ), наполненные нанотрубками галлуазита при низких концентрациях (менее 10 масс.%). Обсуждаются полученные характеристики суспензий, а также влияние концентрации наполнителя, содержания воды и напряженности электрического поля на характеристики ЭРЖ.

## **Шести-координационные нитрокомплексы Со(II)-порфиринов с транс диметилсульфоксидным лигандом**

*Минасян А.С., Оганесян А.А., Куртикян Т.С.*

Центр исследования строения молекул (ЦИСМ) Научно-технологического центра органической и фармацевтической химии АН РА, Ереван, Армения

Методами Фурье-ИК и электронной абсорбционной спектроскопии показано, что взаимодействие ДМСО с Со(Пор)(NO<sub>2</sub>) (Пор - мезо-тетра фенил и мезо-тетра-*p*-толил порфирилато дианионы) ведет к образованию стабильных 6-координационных комплексов (ДМСО)Со(Пор)(NO<sub>2</sub>), в которых нитрит координирован через атом азота, а ДМСО – кислорода.

## **Влияние температуры на люминесцентные свойства гибридных ассоциатов молекул красителя тионина с коллоидными квантовыми точками Ag<sub>2</sub>S**

*Кондратенко Т.С., Камынина Е.Д., Гревцева И.Г., Овчинников О.В.,  
Смирнов М.С., Леонова Л.Ю.*

ФГБОУ ВО "Воронежский государственный университет", г. Воронеж

В работе рассмотрены спектральные проявления гибридной ассоциации коллоидных КТ Ag<sub>2</sub>S с молекулами тионина. Исследована зависимость

эффективности сенсбилизации люминесценции КТ  $\text{Ag}_2\text{S}$  молекулами ТН от температуры Показано, что константа переноса между компонентами ассоциатов не зависит от температуры.

### **Исследование спектральных свойств, $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ и $\text{CdS}$ , выращенных на поверхности нанокристаллов диоксида титана**

*Попова Е.В., Латышев А.Н., Леонова Л.Ю.*

ФГБОУ ВО "Воронежский государственный университет", Воронеж

С помощью спектров поглощения и люминесценции изучены оптические свойства нанокмозитов  $\text{Cd}_{0,3}\text{Zn}_{0,7}\text{S}:\text{TiO}_2$  и  $\text{CdS}:\text{TiO}_2$ . Обнаружены изменения люминесцентных свойств нанокристаллов  $\text{Cd}_{0,3}\text{Zn}_{0,7}\text{S}$  и  $\text{CdS}$  вещества в процессе их конгломерации с наночастицами  $\text{TiO}_2$ , которые согласуются с результатами, полученными при изучении их абсорбционных свойств.

### **Динамика изменения концентрации кислорода в биологических тканях при импульсно-периодическом возбуждении фотосенсибилизаторов**

*Летута С.Н., Алиджанов Э.К., Ишемгулов А.Т., Лантух Ю.Д.,*

*Пашкевич С.Н., Чакак А.А.*

ФГБОУ ВО «Оренбургский государственный университет», г. Оренбург

Фотодинамическая активность кислорода и динамика изменения его концентрации в опухолях и нормальных тканях мышей и крыс исследована по замедленной флуоресценции красителей-фотосенсибилизаторов, возникающей в результате синглет-триплетной аннигиляции синглетного кислорода и триплетных возбуждений красителей.

### **Фотохимические и люминесцентные свойства 1-пиренил- и 9-фенантрил-хинолинэтиленов в нейтральной и протонированной формах**

*Ли В.М., Будыка М.Ф.*

ИПХФ РАН, Черноголовка

Исследование фотохимических и люминесцентных свойств *E*-(1-(1-пиренил)-2-(2-хинолил)этилена **1** и *E*-(1-(9-фенантрил)-2-(2-хинолил)-этилена **2**. показало, что при протонировании квантовый выход транс-цис фотоизомеризации **1** уменьшается, а **2**, наоборот, увеличивается; квантовые выходы цис-транс фотоизомеризации увеличиваются, а люминесценции значительно уменьшаются для обоих соединений.

## **Низкотемпературное окисление монооксида углерода на Pd-Ag/CeO<sub>2</sub>**

*Либерман Е.Ю.<sup>1</sup>, Цодиков М.В.<sup>2</sup>, Наумкин А.В.<sup>3</sup>, Николаев С.А.<sup>4</sup>,  
Варгафтик М.Н.<sup>5</sup>*

1. РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва
2. ИНХС им. А.В. Топчиева РАН, Москва
3. ИНОЭС им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва
4. МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва
5. ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

Синтезированы катализаторы Pd-Ag/CeO<sub>2</sub> для процесса низкотемпературного окисления СО. Идентификацию образцов проводили методами РФА, РФЭС, РФЛА, ПЭМ, низкотемпературной адсорбции азота. Показано, что условия формирования биметаллического катализатора оказывают существенное влияние на структуру и активность.

## **Спектральные, структурные и электронные свойства композитных сополимеров на основе полититаноксида с наночастицами золота. Квантовохимическое исследование**

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

Квантовохимическим методом исследованы структура и энергии образования структурных элементов нанокompозитов на основе TiO<sub>2</sub>/НЕМА и TiO<sub>2</sub>/НЕМА/Au. Рассчитаны ИК спектры наиболее выгодных структурных элементов. Исследованы электронные и спектральные свойства композитных сополимеров, а также процесс переноса электронной плотности. 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.

## **Противоионы как способ регулирования параметров ПЛГА-НЧ с доксорубицином**

*Максименко О.О., Шипуло Е.В., Ванчугова Л.В., Осипова Н.С., Гельперина С.Э.  
ООО «Технология лекарств», Химки, Московская область*

Исследовано влияние технологических параметров получения наносомальной формы доксорубицина на ее характеристики. Показано, что изучено влияние противоионов на параметры PLGA наночастиц с доксорубицином. Показано, что использование противоионов, в том числе ионогенных ПАВ, позволяет существенно повысить степень включения доксорубицина в НЧ.

## **Изучение различных конформаций молекул казеина методами квантовой химии**

*Маматова А.А.<sup>1</sup>, Савостина Л.И.<sup>1,2</sup>*

1. КФУ, Казань
2. КФТИ КазНЦ РАН, Казань

Проведены квантово-химические расчеты различных конформаций молекул белка (альфа– и каппа-казеина) в газовой фазе и в растворителе (вода) в программном пакете ORCA. В рамках метода GIAO получены данные по химическим сдвигам протонов <sup>1</sup>H.

## **Влияние Fe (III), Bi(III), Pb(II) –ионов на фотохимические свойства TiO<sub>2</sub> / F:SnO<sub>2</sub> пленок, полученных из алкоксида титана**

*Маслов Д.А.<sup>1</sup>, Цодиков М.В.<sup>1</sup>, Гринберг В.А.<sup>2</sup>, Гришин М.В.<sup>3</sup>*

1. ИНХС РАН, Москва,
2. ИФХЭ РАН, Москва,
3. ИХФ РАН, Москва.

Разработан метод создания TiO<sub>2</sub> пленки на поверхности F:SnO<sub>2</sub> / стекло на основе раствора алкоксида титана. Исследовано влияние добавление ионов железа (III), свинца (II) и висмута (III) на фотоэлектрокаталитическую активность в исследовании модельной реакции окисления метанола при 465 нм.

## **Новые каталитические системы олигомеризации этилена на основе комплексов никеля**

*Гускаев В.А.<sup>1</sup>, Зубкевич С.В.<sup>1</sup>, Гагиева С.Ч.<sup>1</sup>, Махаев В.Д.<sup>2</sup>, Петрова Л.А.<sup>2</sup>*

1. Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва
2. ИПХФ РАН, Черноголовка

Методами твердофазного синтеза при механической активации исходных веществ синтезированы координационные соединения никеля(II) с производными пиразола. Изучена каталитическая активность полученных прекатализаторов в реакции олигомеризации этилена. Продуктами реакции являются преимущественно бутены. Исследовано влияние условий реакции (природа активатора, модификатора, соотношение активатор/прекатализатор и т.д.) на производительность каталитических систем и состав образующихся продуктов. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 16-03-00643 А).

## Численное моделирование образования частиц сажи в условиях камеры сгорания дизеля: влияние добавок $\text{H}_2\text{O}_2$ и $\text{H}_2$

*Агафонов Г.Л.<sup>1</sup>, Власов П.А.<sup>1,2</sup>, Медведев С.П.<sup>1</sup>, Рябиков О.Б.<sup>1,3</sup>,  
Смирнов В.Н.<sup>1</sup>, Хомик С.В.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ИХФ РАН, Москва

<sup>2</sup>НИЯУ МИФИ, Москва

<sup>3</sup>ОИВТ РАН, Москва

Проведены расчетно-теоретические исследования образования частиц сажи при воспламенении и горении богатой смеси *n*-гептана (суррогата дизельного топлива) с воздухом ( $\varphi = 3.0$ ) в условиях камеры сгорания дизеля. Получено хорошее качественное согласие результатов расчетов с экспериментальными данными.

## Прямой метод контроля качества поверхности мелованных видов бумаги

*Михалева М.Г., Втюрина Д.Н., Курсанкин А.А., Никольский С.Н., Стовбун С.В.*  
ИХФ РАН, Москва

В работе выполнен анализ качества поверхности целлюлозно-бумажных материалов с применением атомно-силовой микроскопии (АСМ). Показана универсальность и объективность данного метода для различных видов материалов. Используемый в работе метод прямого анализа поверхности может в перспективе рассматриваться как метод оперативного контроля процессов поверхностной обработки различных материалов.

## Теоретическое описание импульсной Оверхаузеровой ДПЯ

*Насибулов Е.А.<sup>1,2</sup>, Кирютин А.С.<sup>1,2</sup>, Юрковская А.В.<sup>1,2</sup>, Фит Х.-М.<sup>1,3</sup>,  
Иванов К.Л.<sup>1,2</sup>*

1. МТЦ СО РАН, Институтская За, г. Новосибирск, 630090, Россия
2. НГУ, Институтская За, г. Новосибирск, 630090, Россия
3. Freie Universitdt Berlin, Arnimallee 14, Berlin, 14195, Germany

Представлен общий подход к импульсной оверхаузеровой ДПЯ. Развитая теория рассматривает импульсную накачку ЭПР переходов произвольной импульсной последовательностью. Подробно анализируется зависимость усиления ЯМР от длительности как импульса, так и фронта импульса. Обсуждаются неоднородно уширенные и многокомпонентные спектры ЭПР. Исследована зависимость усиления ЯМР от скорости Гейзенберговского обмена. Показано, что близкие к максимально возможным теоретически усиления достижимы даже при малой доле времени накачки ( $DC$ ). Приведён

подробный анализ зависимости эффекта ДПЯ от  $DC$ , времён электронной релаксации, формы импульса и длительности фронта. Экспериментальные данные по ДПЯ в низких полях хорошо описываются представленной теорией.

### **Применения не традиционного сырья в процессах нефтепереработки**

*Насуллаев Х.А., Джалалова Ш.Б., Тешабаев З.А., Сайдуллаев Б., Юнусов М.П.*  
Узбекский научно-исследовательский химико-фармацевтический институт, г. Ташкент. Узбекистан.

В настоящей работе рассмотрена взаимосвязь текстуры носителей и размеров частиц гидрирующих элементов и активности Co-Mo катализаторов полученных с применением отработанного адсорбента в процессах гидрообессеривания, гидрирования и гидродеоксигенации, а также использования 15% нерафинированного хлопкового масла в смеси нефтяной дизельной фракцией.

### **Растворение и ассоциация биологических полимеров в водных средах различной кислотности. Молекулярно-динамическое исследование**

*Наумов В.С., Игнатов С.К., Авдошин А.А.*

Нижегородский Государственный Университет им. Н.И. Лобачевского

Усовершенствовано силовое поле для МД моделирования хитозана и его производных. Определена степень протонирования при которой начинается растворение полимера в водной среде. Изучено влияние ММ полимера на кинетику растворения. Установлено характерное время ассоциации хитозана из гомогенного раствора. Методом PMF определена энергия координации хитозана с димером инсулина.

### **Синергизм каталитического действия Au-Cu, Au-Ag и Au-Zr композитов в прямой конверсии этанола в линейные альфа-спирты**

*Николаев С.А.<sup>1</sup>, Эзжселенко Д.И.<sup>1</sup>, Егоров А.В.<sup>1</sup>, Чумакова Н.А.<sup>1</sup>, Чистяков А.В.<sup>2</sup>, Арапова О.В.<sup>2</sup>, Жарова П.А.<sup>2</sup>, Губанов М.А.<sup>2</sup>, Гришин М.В.<sup>3</sup>*

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

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

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

Получены биметаллические образцы  $M/Au/Al_2O_3$  ( $M = Cu, Ag, Zr$ ) и их монометаллические аналоги. Изучены закономерности превращения этанола в бутанол-1, гексанол-1 и октанол-1 на полученных композитах. Установлено, что выход продуктов зависит от относительного содержания биметаллических частиц и увеличивается в ряду:  $Au-Cu > Au-Ag > Au-Zr$ .

## **Установка ИХФ РАН для физико-химического модифицирования товарной целлюлозы**

*Ковалева К.И.<sup>1</sup>, Политенкова Г.Г.<sup>1</sup>, Горшков В.В.<sup>2</sup>, Усачев С.В.<sup>1</sup>,  
Кирсанкин А.А.<sup>1</sup>, Никольский С.Н.<sup>1</sup>, Стовбун С.В.<sup>1</sup>*

1. Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, г. Москва
2. ООО «НПО АСУ ТП», г. Лобня МО

В ИХФ РАН разработана и запущена в эксплуатацию экспериментальная установка с АСУ ТП для модифицирования любых видов целлюлозы (в том числе, товарной древесной целлюлозы из хвойных и лиственных пород древесины), обеспечивающая получение конечной продукции, полностью отвечающей требованиям, предъявляемым к целлюлозе для химической переработки, включая хлопковую целлюлозу.

## **Диамидофосфитные лиганды в Pd-катализируемых ассиметрических реакциях.**

*Новиков И.М., Зимарев В.С., Фирсин И.Д.*  
РГУ имени С.А. Есенина, г. Рязань

Разработали и синтезировали библиотеку легко доступных P,N,N-диамидофосфитных лигандов оксазолинового ряда, содержащих 1,3,2-диазафосфолидиновые кольца и пиридиновый фрагмент.

## **Методы вычисления концентрационных пределов**

*Осипов А.Л., Трушина В.П.*

Новосибирский государственный университет экономики и управления,  
г. Новосибирск

Исследуются структурно-неаддитивные модели, учитывающие парциальные вклады структурных элементов химических веществ, к вычислению концентрационных пределов воспламенения. Приводятся результаты оценки эффективности данного подхода на выборках из широкого спектра химических веществ.

## **Селективная каталитическая деоксигенация ацетона в углеводородной среде на цеолитных катализаторах.**

*Паланкоев Т.А., Дементьев К.И., Хаджиев С.Н.*  
ИНХС РАН им. А.В. Топчиева, Москва

Целью работы является изучение влияния углеводов различных классов на маршруты превращения ацетона в присутствии цеолитных катализаторов.

Полученные результаты свидетельствуют, что углеводородная среда может влиять на превращение ацетона через реакции переноса водорода.

### **Особенности поведения Fe/Сагт и FeCu/Сагт катализаторов при активации монооксидом углерода и синтез-газом.**

*Панкина Г.В., Чернавский П.А., Казак В.О.*

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

Изучены физико-химические свойства Fe/Сагт и FeCu/Сагт катализаторов СФТ в процессе активации монооксидом углерода и синтез-газом. Показано, что при их активации в токе СО и синтез-газе в процессе карбидирования образуются различные химические соединения: в токе СО - преимущественно магнетит Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, в токе СО/Н<sub>2</sub> - преимущественно карбид Хэгга  $\chi$  – Fe<sub>5</sub>C<sub>2</sub>.

### **Квантово-химический расчёт поляризуемости термодинамически наиболее стабильных изомеров фуллеренов C<sub>20</sub> – C<sub>720</sub>**

*Панкратьев Е.Ю., Хатымов Р.В.*

Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН, Уфа

В квантово-химическом приближении РВЕ/3 $\zeta$  изучены термодинамически наиболее стабильные или приближающиеся к ним изомеры фуллеренов. Получена зависимость поляризуемости  $\alpha$ (А<sup>3</sup>) фуллеренов от количества атомов углерода (n). Общий набор данных хорошо описывается квадратичной зависимостью  $-6.561+1.485n+0.002n^2$ .

### **Реакции фотоизомеризации и фотоциклоприсоединения в бис-стирилбензохинолиновой диаде с 2,3-нафтиленовым мостиком**

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

ФГБУН ИПХФ РАН, г. Черноголовка

Показано, что в бис-стирилбензохинолиновой диаде, в которой два стирилбензохинолиновых фрагмента связаны между собой 2,3-нафтиленовым мостиком, протекает эффективная реакция [2+2] фотоциклоприсоединения с образованием тетразамещенного циклобутана.

### **Тепловое поведение цепочки нановключений жидкого Рb, связанных одной дислокацией в Al матрице**

*Прокофьев С.И.<sup>1</sup>, Йонсон Э.<sup>2</sup>, Дамен У.<sup>3</sup>*

1. ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия

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



### 3. NCEM, LBNL, Berkeley, CA, USA

С помощью *in-situ* ПЭМ в сплаве  $Al_{0.95}Pb_{0.05}$  исследовано тепловое движение цепочки из 12 нановключений жидкого Pb, связанных одной закрепленной на концах дислокацией. Показано, что их можно рассматривать как систему связанных осцилляторов и ожидать пространственной и временной коррелированности их теплового движения.

### **Влияние магнитного поля на рост фототрофных пурпурных бактерий**

*Проскуряков И.И.*  
ИФПБ РАН, Пущино

Впервые обнаружен эффект магнитных полей 5 - 2000 Гс на фототрофный рост пурпурной бактерии *Allochromatium minutissimum*. Такая магниточувствительность объясняется зависимостью от магнитного поля синглет-триплетного деления возбуждения каротиноидов, изменяющей вероятность переноса энергии на реакционные центры фотосинтеза.

### **О притяжении вакансий на поверхности Cu(111)**

*Простнев А.С., Шуб Б.Р., Гостева Н.Н.*  
ИХФ РАН, Москва

Представлены результаты квантово-химических расчетов методом функционала плотности энергетических характеристик поверхности Cu(111) с парой близко расположенных вакансий. Показано, что для вакансий в соседних узлах имеется эффективное притяжение с энергией 0.26 эВ.

### **Влияние стеклофазы $V_2O_5 \cdot GeO_2$ на свойства нанослоев AgI**

*Разумцев А.А., Тверьянович Ю.С., Тверьянович А.С., Томаев В.В.*  
СПБГУ, Санкт-Петербург

Методами РФА и импедансометрии показано на примере пленок, состоящих из нанослоев AgI и стекла ( $V_2O_5 \cdot GeO_2$ ), что размягченное стекло способно "снять отпечаток" кристаллической решетки и сохранить его при охлаждении ниже температуры размягчения. Исследование выполнено при поддержке РФФИ, проект 17-03-00121.

## **Узкоугольный гиперспектрометр (угол зрения $3,5^0$ ) видимого и ближнего инфракрасного диапазона**

*Виноградов А.Н.<sup>1</sup>, Егоров В.В.<sup>2</sup>, Калинин А.П.<sup>3,4</sup>, Родионов А.И.<sup>1</sup>,  
Родионов И.Д.<sup>4</sup>, Родионова И.П.<sup>4</sup>*

1. ЗАО «НТЦ «Реагент», г. Москва
2. ИКИ РАН, г. Москва
3. ИПМех РАН, г. Москва
4. ИХФ РАН, г. Москва

Разработан гиперспектрометр на диапазон 400 – 1000 нм с углом зрения  $3,5^0$ . Он построен по типу push-boom сенсора. Лабораторные испытания гиперспектрометра подтвердили его соответствие заложенным при проектировании требованиям.

## **Использование ультрафиолетовых и гиперспектральных сенсоров для изучения коронных разрядов, процессов, горения и взрыва**

*Виноградов А.Н.<sup>1</sup>, Егоров В.В.<sup>2</sup>, Калинин А.П.<sup>3,4</sup>, Родионов А.И.<sup>1</sup>,  
Родионов И.Д.<sup>4</sup>, Родионова И.П.<sup>4</sup>*

1. ЗАО «НТЦ «Реагент», г. Москва
2. ИКИ РАН, г. Москва
3. ИПМех РАН, г. Москва
4. ИХФ РАН, г. Москва

Рассматривается использование новейших оптоэлектронных приборов (УФ-С сенсора и гиперспектрометров различных спектральных диапазонов) для изучения коронных разрядов, процессов, горения и взрыва.

## **Конверсия спиновой намагниченности в долгоживущие спиновые состояния в многоспиновых системах**

*Родин Б.А.<sup>1,2</sup>, Кирютин А.С.<sup>1,2</sup>, Юрковская А.В.<sup>1,2</sup>, Иванов К.Л.<sup>1,2</sup>*

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

Предложен метод генерации долгоживущих спиновых состояний в многоспиновых системах при помощи адиабатического переключения РЧ поля. Проведены расчеты эффективности конверсии спиновой намагниченности в долгоживущий спиновый порядок различного типа. Проведены эксперименты по получению всех возможных долгоживущих состояний в четырехспиновых и пятиспиновых системах. Измерены времена жизни таких состояний, проведен теоретический анализ результатов.

## **Кросс-метатезис между производными полинорборнена и полициклооктена: влияние боковых заместителей**

*Роенко А.В., Денисова Ю.И., Грингольц М.Л., Кренцель Л.Б., Шандрюк Г.А., Кудрявцев Я.В., Литманович А.Д., Финкельштейн Е.Ш.  
ИИХС РАН, Москва*

Синтезированы новые мультиблок-сополимеры циклооктена и норборнена с гидроксильным и триметилсилильным заместителями. С помощью <sup>1</sup>H ЯМР-мониторинга изучена кинетика реакции. Установлено, что введение заместителей существенно снижает скорость кросс-метатезиса. Определены факторы, влияющие на свойства и строение сополимеров.

## **Фотопроцессы и спиновые магнитные эффекты в пленках полимерных композитов с рубреном и магнитными наночастицами: их взаимодействие с возбужденными состояниями**

*Румянцев Б.М.<sup>1</sup>, Берендяев В.И.<sup>2</sup>, Леонтьев В.Г.<sup>3</sup>, Бибииков С.Б.<sup>1</sup>, Пибалк А.В.<sup>2</sup>, Коварский А.Л.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ИБХФ РАН, Москва

<sup>2</sup>НИФХИ, Москва

<sup>3</sup>ИМЕТ РАН, Москва

Изучение экситонной фотопроводимости и термостимулированных токов в пленках полимерных композитов рубрена с магнитными наночастицами (МНЧ) показало, что накопление запаса МНЧ с захваченными носителями приводит к существенному снижению магниточувствительности экситонной фотопроводимости в слабых полях, что позволяет предположить изменение магнитных характеристик МНЧ.

## **Парамагнетизм полиимидов на основе парафенилендиамина, участие радикалов в процессах фотогенерации носителей тока**

*Румянцев Б.М.<sup>1</sup>, Льяо Д.Дж.<sup>2</sup>, Хуанг Й.Ч.<sup>2</sup>, Лозинова Т.А.<sup>1</sup>, Берендяев В.И.<sup>3</sup>, Ищенко А.А.<sup>4</sup>, Заиков Г.Е.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ИБХФ РАН, Москва

<sup>2</sup>Университета Науки и Технологии, Тайвань, Тайбэй

<sup>3</sup>НИФХИ, Москва

<sup>4</sup>МИТХТ, Москва

Для образцов синтезированных полиимидов (ПИ) на основе N,N, N',N'-замещенного парафенилендиамина с различными акцепторами на воздухе обнаружен парамагнетизм при комнатной температуре, зависящий от структуры акцепторного фрагмента в твердой фазе и в растворе, обусловленный образованием стабильных катион-радикалов (КР).

## **Свойства железосодержащих композиционных материалов на основе полимера, проявляющих активность в реакции гидрирования СО**

*Рыжикова А.И., Чудакова М.В., Дементьева О.С., Хаджиев С.Н.*  
ИНХС РАН, Москва

Показано, что длительность термообработки на стадии формирования композита значительно влияет на фазовый состав и структуру конечного катализатора и, как следствие, на его активность в синтезе Фишера-Тропша.

## **Самоорганизация и свойства водных дисперсных систем на основе(S)- и (R)-лизина в интервале низких концентраций и физиологически важных температур**

*Рыжкина И.С.<sup>1</sup>, Сергеева С.Ю.<sup>1</sup>, Сабирзянова Л.Р.<sup>1</sup>, Киселёва Ю.В.<sup>1</sup>,  
Тимошева А.П.<sup>1</sup>, Сафиуллин Р.А.<sup>2</sup>, Шевелёв М.Д.<sup>3</sup>*

<sup>1</sup> ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, г. Казань

<sup>2</sup> КНИТУ, г. Казань

<sup>3</sup> КФУ, г. Казань

Изучена самоорганизация, спектральные и физико-химические свойства выдержанных в естественных и гипoeлектромагнитных условиях систем на основе (S)- и (R)-Lys (**1** и **2**) в области концентраций  $1.0 \cdot 10^{-18}$ - $1.0$  М в интервале температур 25-45°C. В системах **1** и **2** выше и ниже пороговой концентрации  $1.0 \cdot 10^{-5}$  М происходит образование доменов и наноассоциатов и появление в УФ-спектрах полосы поглощения на участке 210-290 нм с максимумом около 225 нм. В системе **1** это явление наблюдаются в области  $1.0$ - $1.0 \cdot 10^{-14}$  М, в системах **2** только в интервале  $1.0 \cdot 10^{-6}$ - $1.0 \cdot 10^{-8}$  М.

## **Ингибирующее действие некоторых биоантиоксидантов и их смесей в разных модельных системах**

*Сажина Н.Н.*  
ИБХФ РАН, Москва

В настоящей работе проведено изучение ингибирующего действия нескольких значимых биоантиоксидантов и их бинарных смесей двумя оперативными методами: хемилюминесцентным (ХЛ) с окислительной модельной системой «гемоглобин - (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) – люминол» и электрохимическим (амперометрическим). Полученные результаты могут быть использованы в медико-биологических исследованиях.

## **Особенности взаимодействия CO и H<sub>2</sub> на поверхности наночастиц золота, нанесенных на ВОПГ**

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

Методами сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии установлено, что последовательная экспозиция в H<sub>2</sub> и CO наночастиц золота, нанесенных на подложку из высоко ориентированного пиролитического графита (ВОПГ), приводит к образованию органических соединений, предположительно содержащих альдегидную группу. Получено доказательство непосредственного связывания H<sub>2</sub> с наночастицами золота, нанесенными на подложку из ВОПГ.

## **Адсорбционные характеристики кукурбит[8]урилы на межфазной границе электрод/раствор**

*Свиридова Л.Н.<sup>a</sup>, Стенина Е.В.<sup>a</sup>, Петров Н.Х.<sup>b</sup>*

<sup>a</sup> МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва

<sup>b</sup> Центр фотохимии РАН, Москва

Методом спектроскопии электрохимического импеданса изучено адсорбционное поведение кукурбит[8]урилы (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>)<sub>8</sub> (CB8) на межфазной границе электрод/раствор. С использованием метода регрессионного анализа рассчитаны параметры адсорбционных слоев, формирующихся на отрицательно и положительно заряженной поверхности электрода.

## **Механизм окисления 2,3,5,6 тетра-метил-пирозин-ди-N-оксида - медиатора электрокаталитического окисления изопропанола на электродах из стеклоуглерода и одностенных углеродных нанотрубок**

*Кулаковская<sup>1\*</sup> С.И., Куликов<sup>1</sup> А.В., Свиридова<sup>2</sup> Л.Н., Стенина<sup>2</sup> Е.В.*

<sup>1</sup> ИХФи РАН, г.Черноголовка

<sup>2</sup> МГУ имени М.В. Ломоносова Химический факультет, г. Москва

Методом циклической вольтамперометрии на электродах из стеклоуглерода (СУ) и одностенных углеродных нанотрубок (ОСУНТ) изучен механизм окисления феназин-ди-N-оксида в ацетонитрильных растворах LiClO<sub>4</sub> как в отсутствие, так и в присутствии изопропанола.

Каталитическая эффективность окисления i-PrOH на ОСУНТ-электроде в 17 раз выше, чем на стеклоуглероде.

## **Разработка физико-химического предскрининга биоэффектов растворов биологически активных веществ низких концентраций**

*Сергеева С.Ю.<sup>1</sup>, Рыжкина И.С.<sup>1</sup>, Сабирзянова Л.Р.<sup>1</sup>, Кузнецова Т.В.<sup>2</sup>,  
Зайнулгабидинов Э.Р.<sup>2</sup>, Князев И.В.<sup>2</sup>, Петров А.М.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, г. Казань

<sup>2</sup> ИПЭН АН РТ, г. Казань

Изучение самоорганизации и физико-химических свойств дисперсных систем на основе пестицида метафоса (**1**) в интервале концентраций  $1 \cdot 10^{-5}$ - $1 \cdot 10^{-17}$  М позволило спрогнозировать и подтвердить биоэффекты в этом интервале концентраций. Показано, что сила и знак воздействия **1** на растения и гидробионты зависит от природы дисперсной фазы и тест-объекта.

## **Поликонденсация силикатов в присутствии кластерных анионов бора $[B_{10}Cl_{10}]^{2-}$ , $[B_{10}H_{10}]^{2-}$ , $[B_{12}H_{12}]^{2-}$**

*Скачкова В.К.<sup>1</sup>, Малинина Е.А.<sup>2</sup>, Гоева Л.В.<sup>2</sup>, Грачев А.В.<sup>1</sup>, Авдеева В.В.<sup>2</sup>,  
Шаулов А.Ю.<sup>1</sup>, Берлин А.А.<sup>1</sup>, Кузнецов Н.Т.<sup>2</sup>*

1.ИХФ РАН, Москва

2.ИОНХ РАН, Москва

В супрамолекулярных системах силикаты натриевого жидкого стекла/кластерные анионы бора  $[B_{10}Cl_{10}]^{2-}$ ,  $[B_{10}H_{10}]^{2-}$ ,  $[B_{12}H_{12}]^{2-}$  исследован процесс поликонденсации с участием силанольных групп. Проведен анализ данного процесса в зависимости от особенностей электронного строения полиэдрических анионов.

## **Реакторные смеси сверхвысокомолекулярного полиэтилена с сополимерами этилен/гексен-1, полученные на гомогенном металлоценовом катализаторе**

*Старчак Е.Е., Ушакова Т.М., Крашенинников В.Г., Гринев В.Г.,  
Новокионова Л.А.  
ИХФ РАН, Москва*

Методом последовательной полимеризации получены реакторные полимерные смеси сверхвысокомолекулярно полиэтилена и сополимеров этилен/гексен-1. Изучены молекулярно-массовые характеристики, морфология, деформационно-прочностные, динамические механические свойства и ПТР смесей в зависимости от содержания и состава сополимерной фракции.

## **Противоопухолевая активность аллильных комплексов палладия с гетероароматическими лигандами *in vivo***

*Кобляков В.А.<sup>1</sup>, Столяров И.П.<sup>2</sup>*

1. РОНЦ им. Н.Н. Блохина Минздрава РФ, Москва

2. ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

Противоопухолевая активность катионных аллильных комплексов палладия  $[Pd(C_3H_5)L]Cl$ , где L = 4,7-диметил-1,10-фенантролин и Dipy, при существенно меньшей токсичности сопоставима с действием цис-платина на перевиваемые опухоли мышей. Механизм действия таких комплексов отличается от известного, что открывает новые возможности химиотерапии.

## **Термическое и фотолитическое разложение перхлоратов тетразолат-амминатов кобальта(III)**

*Тверьянович Ю.С.<sup>1</sup>, Абдрашитов Г.О.<sup>1</sup>, Аверьянов А.О.<sup>1</sup>, Илюшин М.А.<sup>2</sup>,  
Тверьянович А.С.<sup>1</sup>, Шугалей И.В.<sup>2</sup>*

1- СПбГУ, Санкт-Петербург

2- СПбГТУ, Санкт-Петербург

Методами элементного анализа, ИК, КР и масс-спектрометрии проведено сравнительное изучение продуктов термического и фотолитического разложения фоточувствительных энергонасыщенных комплексов - перхлоратов тетразолат-амминатов кобальта(III).

## **Специфическая адсорбция одно- и многоатомных спиртов на графитированной термической саже**

*Терентьев А.В.<sup>1</sup>, Варфоломеева В.В.<sup>1</sup>, Ульянов А.В.<sup>2</sup>, Мажелия Е.В.<sup>3</sup>*

1. Самарский университет, Самара

2. ИФХЭ РАН, Москва

3. 25 ГосНИИ химмотологии Минобороны России, Москва

Методом газо-адсорбционной хроматографии и молекулярно-статистической теорией адсорбции были определены константы Генри одно- и многоатомных спиртов на графитированной термической саже (ГТС). Показана важность учёта специфического межмолекулярного взаимодействия ОН-группы адсорбата с  $\pi$ -электронами ГТС.

## **Конформационный анализ нормальных и изомеризованных амилоидных пептидов Abeta1-42 для определения потенциальных интерфейсов связывания с белками-мишенями**

*Ткачёв Я.В., Аджубей А.А.*

Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, Москва

Методом молекулярной динамики и набором статистических методов проведен конформационный анализ нормального и изомеризованного пептидов Abeta1-42, и найдены наиболее стабильные конформации, использованные для определения потенциальных интерфейсов взаимодействия с HSA, PrPC и бета-2-микроглобулином.

## **Направленное движение частиц, генерируемое флуктуациями их размера**

*Махновский Ю.А.<sup>1</sup>, Зицерман В.Ю.<sup>2</sup>, Трахтенберг Л.И.<sup>3</sup>, S.H. Lin*

1. ИНХС РАН, г. Москва

2. ОИВТ РАН, г. Москва

3. ИХФ РАН, г. Москва

4. IAMS Academia Sinica, Taipei

Флуктуации размера частицы, находящейся в асимметричном локальном окружении, порождают ее дрейф. Изучено влияние геометрии окружения, амплитуды и частоты флуктуаций на скорость дрейфа. Установлено, что зависимость скорости дрейфа от частоты возмущений имеет резонансный характер.

## **Квантово-химическое моделирование строения сольватных комплексов LiBF<sub>4</sub> в этиленкарбонате с учетом данных ЯМР спектроскопии высокого разрешения**

*Тулибаева Г.З., Шестаков А.Ф., Волков В.И., Ярмоленко О.В.*

ИПХФ РАН, г. Черноголовка Московской области

Исследована ионная сольватация в растворах LiBF<sub>4</sub> в этиленкарбонате (ЭК) методами ЯМР, электрохимического импеданса и квантово-химического моделирования. Зависимость состава сольватных комплексов от концентрации соли получена на основе сопоставления теоретических и экспериментальных хим.сдвигов ядер <sup>7</sup>Li и <sup>11</sup>B раствора LiBF<sub>4</sub> в ЭК.



## **Разработка СВС мембраны для процесса парового риформинга диметилового эфира**

*Уваров В.И.<sup>1</sup>, Алымов М.И.<sup>1</sup>, Лорян В.Э.<sup>1</sup>, Уваров С.В.<sup>1</sup>, Боровинская И.П.<sup>1</sup>,  
Шустов В.С.<sup>1</sup>, Федотов А.С.<sup>2</sup>, Антонов Д.О.<sup>2</sup>, Цодиков М.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ИСМАН РАН, г. Черноголовка, МО.

<sup>2</sup>ИНХС РАН, г. Москва,

Работа посвящена формированию каталитически активных мембран нового поколения методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) с восстановительной стадией в вакууме с использованием крупных фракций частиц никеля для формирования каркаса мембраны с открытыми порами 2,6-3,1 мкм.

## **Масс-спектрометрическое исследование влияния внешних факторов на разложение НДМГ на поверхности шунгитового материала**

*Полунина И.А., Полунин К.Е., Ульянов А.В., Буряк А.К.*

ИФХЭ РАН, Москва

Представлены результаты хромато-масс-спектрометрических исследований влияния минерального сорбента (шунгита) и температуры окружающей среды на дезактивацию образцов природных грунтов и воды, в различной степени загрязненных НДМГ. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 15-08-08006)

## **Формирование пространственного и потенциального рельефа границы раздела «полупроводник - органическое покрытие» при структурировании органического слоя металлосодержащими наночастицами**

*Стецюра С.В., Маляр И.В., Харитонова П.Г.*

СГУ им. Н.Г. Чернышевского, Саратов

Показано, что металлосодержащие НЧ, внедренные в органическое покрытие создают локальные электрические поля на поверхности полупроводника, способствующие выходу заряженных дефектов из фотоактивного слоя полупроводника на поверхность. Исследования поддержаны РФФИ (грант № 16-08-00524\_а).

## **Процессы самоорганизации металлических и металлосодержащих частиц в органической матрице, полученной при использовании различных технологических приемов**

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

Предложена полуколичественная модель, учитывающая доминирующие физико-химические процессы, приводящие к формированию органических покрытий с металлосодержащими НЧ с использованием методов послойной фотостимулированной адсорбции из раствора и Ленгмюра-Блоджетт. Исследования поддержаны РФФИ (грант № 16-08-00524\_a).

## **Особенности диссоциативного присоединения низкоэнергетических электронов молекулами фруктозы и глюкозы**

*Щукин П.В., Муфтахов М.В., Хатымов Р.В.*  
ИФМК УНЦ РАН, Уфа

Исследованы процессы резонансного захвата свободных, контролируемых по энергии электронов молекулами моносахарида глюкозы и ее структурного изомера – фруктозы. Установлены основные сходства и отличительные черты процессов образования отрицательных ионов.

## **Си-Со катализаторы превращения синтез-газа в спирты C2-C4**

*Чудакова М.В., Иванцов М.И., Куликова М.В., Карначёва Г.П., Хаджиев С.Н.*  
ИНХС РАН, Москва

С помощью метода матричной изоляции с применением ИК-излучения сформированы композиционные материалы на основе полимеров различной природы и изучены их физико-химические и каталитические свойства в условиях реакции получения спиртов из синтез-газа.

## **ЭПР диагностика полимерных структур, содержащих биологически активные вещества**

*Чумакова Н.А.<sup>1</sup>, Голубева Е.Н.<sup>1</sup>, Иванова Т.А.<sup>1</sup>, Короткевич А.А.<sup>1</sup>, Кузин С.В.<sup>1</sup>, Попов В.К.<sup>2</sup>, Богородский С.Э.<sup>2</sup>, Тимашев П.С.<sup>2</sup>, Воробьева Н.Н.<sup>2</sup>, Григорьев И.А.<sup>3</sup>, Юшкова Ю.В.<sup>3</sup>, Ивукина Е.А.<sup>4</sup>, Мельников М.Я.<sup>1</sup>, Баграташвили В.Н.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва

<sup>2</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва

<sup>3</sup>Новосибирский институт органической химии СО РАН, Новосибирск

<sup>4</sup>Московская медицинская академия им. И.М. Сеченова, Москва

Получены полимерные микрочастицы и матриксы на основе D,L-полилактида с одновременной импрегнацией парамагнитными веществами, в том числе биологически активными, в среде сверхкритического CO<sub>2</sub>. Показаны возможности спектроскопии ЭПР для диагностики полученных материалов.

### **Теория броуновских моторов со слабо флуктуирующими потенциалами**

<sup>1,2</sup> Шапочкина И.В., <sup>3</sup>Герасимов Г.Н., <sup>3</sup>Громов В.Ф., <sup>1,4</sup> Розенбаум В.М.,  
<sup>1</sup>Лин Ш., <sup>3,5</sup>Трахтенберг Л.И.

<sup>1</sup>Institute of Atomic and Molecular Sciences, Academia Sinica, Taipei 106, Taiwan; Department of Applied Chemistry, National Chiao Tung University, Hsinchu, Taiwan

<sup>2</sup>Физический факультет БГУ, Минск, Беларусь

<sup>3</sup>НИФХИ им. Л.Я. Карпова, Москва

<sup>4</sup>Институт химии поверхности им. А. А. Чуйко НАН Украины, Киев, Украина

<sup>5</sup>ИХФ РАН, Москва

Рассмотрено движение броуновской частицы в слабо флуктуирующем потенциале. Используя теорию возмущений при малых флуктуациях потенциала, выведено общее аналитическое выражение для средней скорости частиц, справедливое как для мигающих, так и для качающихся броуновских моторов с произвольной стохастической или детерминированной временной зависимостью флуктуаций потенциальной энергии. Общность результата позволяет описать сложные системы броуновских моторов с конкурирующими характерными временами; эти системы иллюстрируются моделью броуновского фотомотора с релаксационными процессами конечной продолжительности.

### **Окисление метана и этилена, инициируемое продуктами богатого пламени метана и водорода**

*Шаповалова О.В., Шиянова К.А., Никитин А.В., Озерский А.В., Федоров Д.П.*  
Институт химической физики имени Н.Н. Семёнова РАН, Москва

В работе предложен новый способ получения низших олефинов из метана в термическом газофазном процессе. В качестве источника тепла и метильных радикалов в работе использовано пламя богатой метано-воздушной смеси, полученное в матричной горелке. Такая методика дает возможность конвертировать в олефины не только метан, но и другие низшие алканы.

## **Новый *P, P, P*-тридентатный фосфинобисфосфорамидит на основе (*R<sub>a</sub>*)-BINOL и 2-(дифенилфосфино)этиламина**

*Ширяев А.А.<sup>1</sup>, Чучелкин И.В.<sup>2</sup>, Гаврилов К.Н.<sup>2</sup>*

1. РГРТУ, Рязань
2. РГУ имени С.А. Есенина, Рязань

На основе доступных (*R<sub>a</sub>*)-BINOL и 2-(дифенилфосфино)этиламина, получен новый тридентатный фосфинобисфосфорамидит. В тестовых асимметрических реакциях он обеспечил хорошие величины конверсии и до 86% энантиомерного избытка.

## **Исследование влияния Ni-содержащего катализатора на матричную конверсию метана**

*Шиянова К.А.<sup>1,2</sup>, Шаповалова О.В.<sup>1</sup>, Никитин А.В.<sup>1</sup>*

- 1 ИХФ РАН, Москва
- 2 Московский технологический университет, Москва

При использовании Ni-содержащего катализатора в процессе матричной конверсии метана было замечено, что повышается конверсия кислорода. Возможно, это объясняется тем, что никель увеличивает скорость образования активных центров на поверхности матрицы. Также использование катализатора повышает выход целевых продуктов.

## **Кинетические особенности трансформации опасных химических веществ в природных водах их формы и пути миграции**

*Штамм Е.В.<sup>1</sup>, Скурлатов Ю.И.<sup>2</sup>, Швыдкий В.О.<sup>1</sup>*

1. ИБХФ РАН, г. Москва
2. ИХФ РАН, г. Москва

Проведен анализ существующих представлений об опасных химических веществах применительно к проблеме химической безопасности водных объектов окружающей среды. Рассмотрены пути миграции и трансформации полихлорированных органических соединений в природной водной среде; химико-биологические процессы, оказывающие наибольшее влияние на биологическую полноценность природной водной среды, в частности, процессы с участием промежуточных продуктов восстановления кислорода; ионов металлов переменной валентности и водорастворимых соединений восстановленной серы. Предложены критерии отнесения химических веществ к категории «экологически опасных» для поверхностных водных объектов.

## **Особенности формирования и восстановительной активации оксидных Cu-содержащих соединений со структурой шпинели**

*Штерцер Н.В., Плясова Л.М., Докучиц Е.В., Минюкова Т.П., Юрьева Т.М.*  
ИК СО РАН, г. Новосибирск

Методами ТГ-ДТА и ИКС исследовано формирование и восстановительная активация шпинелей  $\text{CuFe}_x\text{Cr}_{2-x}\text{O}_4$ . Установлено влияние отношения  $\text{Fe}^{3+}/\text{Cr}^{3+}$  на количество примесных анионов, значение температуры кристаллизации шпинели и наблюдаемой энергии активации реакции низкотемпературной паровой конверсии СО.

## **Синтез наноразмерных катализаторов оксида никеля в матрице пористого $\text{Al}_2\text{O}_3$ методом молекулярного наслаивания**

*Яльшиев В.Ш., Каттаев Н.Т., Маматкулов Ш.И., <sup>1</sup>Юнусов М.П.,  
<sup>1</sup>Насуллаев Х.А.*

<sup>1</sup>Узбекский научно-исследовательский химико-фармацевтический институт, Учебно-экспериментальный Центр высоких технологий г. Ташкент. Узбекистан.

В данной работе рассмотрен метод молекулярного наслаивания для выращивания наноструктур оксида никеля для получения нанокатализаторов. Показано что молекулярного наслаивания является наиболее оптимальным способом по сравнению с электрохимическим осаждением при синтезе нанокатализаторов.

## **Квантово-химическое моделирование изменения структур органических катодных материалов при допировании литием**

*Шестаков А.Ф.<sup>1</sup>, Ярмоленко О.В.<sup>1</sup>, Трошин П.А.<sup>1,2</sup>*

1. ИПХФ РАН, г. Черноголовка Московской области
2. Сколтех, Москва

В данной работе проведено квантово-химическое моделирование изменения структур органических материалов – полиимида и полихинона во время литирования. Показаны причины структурной деградации данных материалов, которые находятся в полном соответствии с экспериментальными данными.

## Авторский указатель

*S.H. Lin, 88*

### **А**

*Абдрахманов А.М., 42*  
*Абдрашитов Г.О., 48, 87*  
*Абдуллаев С.Д., 69*  
*Абзалов Н.И., 36*  
*Авдеева В.В., 86*  
*Авдошин А.А., 78*  
*Аверьянов А.О., 87*  
*Агафонов Г.Л., 77*  
*Адамсон С.О., 56, 72*  
*Аджубей А.А., 88*  
*Айбуш А.В., 27*  
*Аксенов А.С., 69*  
*Алиджанов Э.К., 74*  
*Алымов М.И., 89*  
*Амарантов С.В., 66*  
*Амиров И.И., 27*  
*Андреев С.М., 48*  
*Аникин О.В., 33, 48, 49, 68, 71*  
*Антонов Д.О., 49, 89*  
*Анчаров А.И., 29*  
*Арапова О.В., 49, 78*  
*Аронзон Б.А., 53*  
*Астапенко В.А., 25*  
*Аулов В.А., 55*  
*Афанасьев Е.С., 51*

### **Б**

*Бабикова К.Ю., 35*  
*Бабкин А.С., 42*  
*Баграташвили В.Н., 90*  
*Баймуратова Г.Р., 50*  
*Бакиров А.В., 63*  
*Балашов Е.М., 23*  
*Барaboшкина Е.Н., 48*  
*Белоненко М.Б., 71*  
*Белоусов С.И., 73*  
*Бельшева Т.В., 25*  
*Бердинский В.Л., 50*  
*Берендяев В.И., 83*  
*Берестнева Ю.В., 50*  
*Берлин А.А., 86*  
*Бессараб Ф.С., 56*  
*Бибиков С.Б., 83*

*Богданова О.И., 63*  
*Богородский С.Э., 90*  
*Боднева В.Л., 25*  
*Болотов В.А., 27*  
*Боровинская И.П., 89*  
*Борунова А.Б., 41*  
*Борчевкина О.П., 56*  
*Бреславская Н.Н., 60*  
*Бричкин С.Б., 28, 50, 55*  
*Бубнов В.П., 39*  
*Будыка М.Ф., 28, 54, 74, 80*  
*Бузин В.Б., 57*  
*Бузин М.И., 51*  
*Бурангулова Н.Ф., 42*  
*Буряк А.К., 89*  
*Бушмаринов, 57*  
*Быховский М.Я., 43*

### **В**

*Вальнюкова А.С., 28*  
*Ванчугова Л.В., 75*  
*Варгафтик М.Н., 75*  
*Варламов А.С., 35*  
*Варфоломеева В.В., 51, 87*  
*Васильев В.Г., 51*  
*Васильков А.Ю., 28, 49*  
*Васюков В.М., 31*  
*Вдовиченко А.Н., 50*  
*Вдовиченко А.Ю., 53, 61*  
*Веденкин А.С., 51, 52*  
*Виноградов А.Н., 67, 82*  
*Винокур Я.А., 64*  
*Вичутинская Е.В., 63, 64*  
*Власов П.А., 39, 40, 41, 77*  
*Волков В.И., 88*  
*Волков В.Т., 53, 70*  
*Волкова Е.Е., 55*  
*Волкова Н.Н., 53*  
*Волчкова Е.С., 39*  
*Воробьев А.Х., 26*  
*Воробьева Н.Н., 90*  
*Воронцов П.С., 63*  
*Ворсина И.А., 30*  
*Восмерилов С.В., 29, 30*  
*Втюрин Д.Н., 54, 77*  
*Вульпе А.И., 54*  
*Вяткин А.Ф., 70*

### **Г**

*Гаврилов В.К., 54, 61*  
*Гаврилов К.Н., 29, 61, 92*  
*Гавришиова Т.Н., 54, 80*  
*Гагиева С.Ч., 76*  
*Гаджиев О.Б., 32, 55*  
*Гак В.Ю., 55*  
*Гак Л.Н., 61*  
*Гареев К.Г., 35*  
*Гатин А.К., 29, 43, 58, 59, 85*  
*Гвоздева Е.Е., 63*  
*Гельперина С.Э., 75*  
*Герасимов Г.Н., 25, 91*  
*Глазов С.В., 69*  
*Гоева Л.В., 86*  
*Головешкин А.С., 57*  
*Голубев В.К., 29, 57*  
*Голубев Е.К., 36, 55*  
*Голубева Е.Н., 90*  
*Голубков Г.В., 56, 72, 73*  
*Голубков М.Г., 56, 72, 73*  
*Голубь А.С., 57*  
*Гончаров Е.А., 69*  
*Гордон Е.Б., 53*  
*Горенберг А.Я., 30*  
*Горина Е.Н., 30*  
*Горохов М.А., 34*  
*Горшков В.В., 24, 79*  
*Гостев Ф.Е., 27*  
*Гостева Н.Н., 81*  
*Грачев А.В., 86*  
*Гребеничиков Ю.Б., 57*  
*Гревцева И.Г., 58, 73*  
*Григоренко Б.Л., 24*  
*Григорьев И.А., 90*  
*Григорьев Т.Е., 63*  
*Григорьева Т.Ф., 29, 30*  
*Гринберг В.А., 76*  
*Грингольц М.Л., 83*  
*Гринев В.Г., 86*  
*Гринева И.А., 54*  
*Гришин М.В., 29, 33, 43, 58, 59, 60, 76, 78, 85*  
*Громов В.Ф., 25, 91*  
*Губанов М.А., 78*  
*Гудков М.В., 30*  
*Гудошников С.А., 57*

Гуломов Ш.Т., 47  
Гумаргалиева К.З., 67  
Гуревич С.А., 24, 34  
Гусева Д.Г., 31, 59

## **Д**

Далидчик Ф.И., 23  
Далингер И.Л., 66  
Дамен У., 80  
Датий К.А., 31  
Девяткина Е.Т., 29, 30  
Дементьев К.И., 59, 79  
Дементьева О.С., 54, 59,  
84  
Демина В.А., 60  
Денисова Ю.И., 83  
Джалалова Ш.Б., 78  
Дзябченко А.В., 23  
Дмитриевский А.А., 31, 59  
Добровольский Ю.А., 33,  
46, 68  
Докучиц Е.В., 93  
Долин С.П., 60  
Долматов В.Ю., 36  
Дошликова Н.В., 60  
Дубовицкий В.А., 61  
Дураков С.А., 43  
Дутлов А.Е., 39

## **Е**

Еврешинова Н.В., 35  
Егоренков Е.А., 48  
Егоров А.В., 78  
Егоров В.В., 82  
Енгальчева И.А., 59  
Ефремова Н.Ю., 31

## **Ж**

Жарова П.А., 45, 61, 78  
Жеглов С.В., 61  
Жигачев А.О., 31, 59  
Жидомиров Г.М., 31  
Жужгов А.В., 27  
Журавлев К.С., 47  
Журавлева Т.С., 62

## **З**

Завелев Д.Е., 31  
Завьялов С.А., 53, 61, 62  
Загайнов И.В., 62

Загоскин Ю.Д., 63  
Заиков Г.Е., 83  
Зайковский В.И., 57  
Зайнулгабидинов Э.Р., 86  
Зайцева Е.С., 32, 63  
Зайцева Н.И., 63, 64  
Замалютин В.В., 43  
Захаров В.В., 64  
Захаров Ю.А., 28, 31  
Звягин А.И., 64, 65  
Звягина О.В., 65  
Зимарев В.С., 54, 79  
Зицерман В.Ю., 88  
Зленко Д.В., 65  
Зубавичус Я.В., 61  
Зубкевич С.В., 76  
Зюзин И.Н., 66

## **И**

Иванов А.И., 32  
Иванов К.Л., 77, 82  
Иванова О.П., 62  
Иванова Т.А., 90  
Иванцов М.И., 90  
Иванчев С.С., 55  
Иванчева Н.И., 55  
Ивичева С.Н., 66  
Ивукина Е.А., 90  
Игнатов С.К., 32, 55, 75,  
78  
Игнатова А.А., 50  
Игнатьев В.К., 37  
Изюмов М.О., 27  
Иким М.И., 25, 54  
Ильющенков Д.С., 34  
Илюшин М.А., 87  
Исаева Н.Ф., 47  
Исмаилов Э.Г., 41  
Ишемгулов А.Т., 74  
Ищенок А.А., 83

## **Й**

Йонсон Э., 80

## **К**

Казак В.О., 45, 67, 80  
Казаков А.И., 66  
Казарин В.В., 67  
Калинин А.П., 67, 82  
Калинин П.В., 27

Калинина И.Г., 67  
Калинина Т.С., 52  
Калиниченко В.Н., 30  
Камынина Е.Д., 73  
Каплунов И.А., 26  
Капралова Г.А., 33  
Капуста Д.П., 44  
Карабулин А.В., 53  
Каргин Ю.Ф., 66  
Кареев И.Е., 39  
Карелин А.И., 33, 68  
Карпачёва Г.П., 90  
Карпов И.В., 56  
Карпушин А.А., 68  
Каттаев Н.Т., 93  
Каюмов Р.Р., 33, 68  
Квашина К.О., 42  
Кечекьян А.С., 36, 55  
Кирсанкин А.А., 33, 77, 79  
Кирютин А.С., 77, 82  
Кирюхин Д.П., 68  
Киселёв В.Д., 33, 35, 48,  
49, 68, 71  
Киселёва Ю.В., 84  
Кислов В.М., 69  
Кичигина Г.А., 68  
Клапётке Т.М., 29  
Князев И.В., 86  
Кобляков В.А., 87  
Ковалев И.Д., 69  
Ковалева К.И., 24, 79  
Ковалевский С.А., 23  
Коваленко К.А., 42  
Коварский А.Л., 83  
Кожевин В.М., 24, 34  
Кожушнер М.А., 25, 34  
Козлов А.А., 69  
Козловский А.В., 70  
Колченко Н.Н., 29, 60  
Колчина А.С., 70  
Кондратенко Т.С., 58, 64,  
73  
Конобеева Н.Н., 71  
Коновалихин С.В., 69  
Кононенко О.В., 53  
Константинов Г.И., 34  
Коптелов А.А., 35  
Корлюков А.А., 57  
Корнилов Д.А., 33, 35, 48,  
49, 68, 71  
Коробов А.И., 72  
Королев Д.В., 35

Короткевич А.А., 90  
Корчак В.Н., 43, 54  
Костюкевич Ю.И., 35  
Кочетков Р.А., 36  
Крашенинников В.Г., 86  
Кренцель Л.Б., 83  
Криничная Е.П., 62  
Куверова В.В., 56, 72, 73  
Кудрявцев Я.В., 83  
Кузин С.В., 90  
Кузнецов М.С., 54  
Кузнецов Н.М., 73  
Кузнецов Н.Т., 86  
Кузнецова Т.В., 86  
Кулакова А.М., 44  
Кулаковская С.И., 85  
Куликов А.В., 85  
Куликова М.В., 54, 90  
Курдюмов С.С., 34  
Куркин Т.С., 36, 55  
Курочкина Л.С., 66  
Куртикян Т.С., 73  
Кучкина И.О., 55  
Куц П.П., 68

## **Л**

Лантух Ю.Д., 74  
Латышев А.Н., 74  
Лебедев Н.Г., 37  
Левашов В.И., 53  
Левшин И.Б., 51  
Лемперт Д.Б., 66  
Лененко Н.Д., 57  
ленко Д.В., 51  
Леонова Л.С., 46  
Леонова Л.Ю., 65, 73, 74  
Леонтьев В.Г., 83  
Летута А.С., 50  
Летута С.Н., 74  
Летута У.Г., 37  
Ли В.М., 74  
Либерман Е.Ю., 75  
Лидский Б.В., 34  
Лин Ш., 91  
Лисицкий И.С., 54  
Литвин А.А., 52  
Литманович А.Д., 83  
Логачев П.В., 29  
Логинова А.С., 75  
Логинова Е.С., 39  
Лозинова Т.А., 83  
Локтева Е.С., 24

Ломакин С.М., 52  
Лорян В.Э., 89  
Лунин В.В., 67  
Лушкова А.В., 38  
Луцкекина С.В., 24  
Льяо Д.Дж., 83  
Любимов Б.Я., 57  
Ляхов Н.З., 29, 30

## **М**

Мажелия Е.В., 87  
Мазалецкий Л.А., 27  
Макарова Л.И., 51  
Маковийчук М.И., 38  
Максименко О.О., 75  
Максимова М.Г., 61  
Малин Т.В., 47  
Малинина Е.А., 86  
Мальшев Н.С., 73  
Мальцев А.А., 30  
Маляр И.В., 70, 89, 90  
Маматкулов Ш.И., 47, 93  
Маматова А.А., 76  
Мартьянов А.М., 55  
Маслов Д.А., 76  
Масунов А.Э., 55  
Матвеев А.А., 35  
Матвеев В.Н., 53  
Матюшенко В.И., 53  
Махаев В.Д., 76  
Махновский Ю.А., 88  
Медведев С.П., 23, 38, 45,  
77  
Мееров Д.Б., 38  
Мелешкина А.М., 38  
Мельников В.П., 30, 52  
Мельников И.Н., 38  
Мельников М.Я., 90  
Минасян А.С., 73  
Мингазов А.И., 69  
Минюкова Т.П., 93  
Михайлова Т.Ю., 60  
Михалева М.Г., 54, 77  
Михалкин В.Н., 38  
Московский А.А., 24  
Мотин В.Г., 52  
Муфтахов М.В., 44, 90  
Мясоедова В.В., 38

## **Н**

Надточенко В.А., 27

Назарова Н.В., 39  
Насибулов Е.А., 77  
Насуллаев Х.А., 78, 93  
Наумкин А.В., 75  
Наумов В.С., 78  
Некрасов В.М., 39  
Немухин А.В., 24  
Несмелов А.А., 61  
Никитин А.В., 91, 92  
Никитина Т.В., 48  
Никифорова Г.Г., 51  
Николаев Е.Н., 35  
Николаев С.А., 45, 75, 78  
Николаева Т.Н., 52  
Никольский В.М., 39  
Никольский С.Н., 24, 77,  
79  
Нитута А.Н., 65  
Новиков И.М., 61, 79  
Новикова С.Н., 65  
Новокишонава Л.А., 86  
Норко С.И., 59

## **О**

Овчинников О.В., 58, 65,  
73  
Оганесян А.А., 73  
Озерин А.Н., 36, 55  
Озерин С.А., 53, 61  
Озеров Г.К., 56, 72, 73  
Озерский А.В., 91  
Орлов А.А., 37  
Орлов М.Ю., 40  
Орлов Ю.Д., 26, 40  
Осипов А.Л., 79  
Осипова Н.С., 75

## **П**

Павлов Е.А., 29, 30  
Паланкоев Т.А., 79  
Панкина Г.В., 45, 67, 80  
Панкратьев Е.Ю., 80  
Папков В.С., 51  
Пармон В.Н., 27  
Пасынский А.А., 61  
Пашкевич С.Н., 74  
Пебалк А.В., 83  
Передерий М.А., 34  
Перепелица А.С., 58, 64,  
65  
Петров А.М., 86



Петров Н.Х., 85  
Петрова Л.А., 76  
Петрова С.А., 29  
Петухов В.А., 23  
Печ Б., 47  
Пилипенко Е.Н., 69  
Пимкин Н.А., 54  
Плюснин В.Ф., 40  
Плясова Л.М., 93  
Поздняков И.П., 40  
Политенкова Г.Г., 24, 79  
Полунин К.Е., 89  
Полунина И.А., 89  
Пономарев В.И., 69  
Попов В.К., 90  
Попова Е.В., 74  
Посвянский В.С., 25, 34  
Поташова Н.И., 54, 80  
Прокофьев С.И., 80  
Проскураков И.И., 81  
Простнев А.С., 81  
Пугачев В.М., 28, 31

## **Р**

Рабинович А.Б., 32  
Разуваев А.Г., 32  
Разумов В.Ф., 50, 55  
Разумцев А.А., 81  
Ракша Е.В., 50  
Рогозина А.А., 35  
Родин Б.А., 82  
Родионов А.И., 67, 82  
Родионов И.Д., 67, 82  
Родионова И.П., 67, 82  
Родкина Н.В., 58  
Роенко А.В., 83  
Розенбаум В.М., 91  
Романов А.Н., 54  
Ростовщикова Т.Н., 24  
Рубцов Н.М., 67  
Румянцев Б.М., 83  
Рыжикова А.И., 84  
Рыжкина И.С., 84, 86  
Рябиков О.Б., 77

## **С**

Сабирзянова Л.Р., 84, 86  
Савостина Л.И., 76  
Савоськин М.В., 50  
Сажина Н.Н., 84  
Саидов У.Х., 47

Сайдуллаев Б., 78  
Салганская М.В., 69  
Салин А.В., 40  
Саломатина Е.В., 75  
Самойленко Н.Г., 61  
Самофалова Т.В., 65  
Сангинов Е.А., 33, 68  
Сарвадий С.Ю., 29, 33,  
43, 58, 59, 85  
Сафиуллин, 84  
Сахарутов Д.А., 53  
Сахно С.В., 25  
Свиридова Л.Н., 85  
Седов И.А., 35  
Седуш Н.Г., 60  
Селеткова А.В., 40  
Семенов С.А., 67  
Сеплярский Б.С., 36  
Сергеева С.Ю., 84, 86  
Серёгин А.А., 42  
Серёгина Е.А., 42  
Ситников В.Н., 40  
Скачкова В.К., 86  
Скворцов Д.С., 71  
Скоблин А.А., 52  
Скурлатов Ю.И., 63, 64,  
92  
Слуцкий В.Г., 43  
Смирнов В.В., 48  
Смирнов В.Н., 39, 40, 41,  
77  
Смирнов М.С., 58, 65, 73  
Смирнова Л.А., 75  
Спиридонова Е.Ю., 25  
Спирин М.Г., 50, 55  
Старчак Е.Е., 86  
Стенина Е.В., 85  
Стецюра С.В., 70, 89, 90  
Стовбун И.С., 52  
Стовбун С.В., 24, 25, 45,  
51, 52, 65, 77, 79  
Столяров И.П., 41, 87  
Стрелецкий А.Н., 41  
Стрельцов Д.Р., 53, 61  
Сулейманова С.А., 41  
Сычев А.Е., 41

## **Т**

Танашев Ю.Ю., 27  
Тверьянович А.С., 81, 87  
Тверьянович Ю.С., 48, 81,  
87

Тереза А.М., 39, 40, 41  
Терентьев А.В., 51, 87  
Тешабаев З.А., 78  
Тикунова Е.П., 36  
Тимашев П.С., 90  
Тимошева А.П., 84  
Титов А.А., 27  
Тихонов Г.В., 42  
Ткачѳв Я.В., 88  
Товбин Ю.К., 25, 32, 63  
Товстун С.А., 55  
Толочко Б.П., 29  
Томаев В.В., 81  
Трахтенберг Л.И., 25, 88,  
91  
Трошин К.Я., 67  
Трошин П.А., 93  
Трубина С.В., 42, 47  
Трушина В.П., 79  
Тулибаева Г.З., 88  
Туровцев В.В., 26, 40  
Тускаев В.А., 76  
Тухбатуллин А.А., 42  
Тюрин А.И., 59

## **У**

Уваров В.И., 49, 89  
Уваров С.В., 89  
Удалова Т.А., 29, 30  
Ульянов А.В., 87, 89  
Усачев С.В., 79  
Ушаков И.Е., 57  
Ушакова Т.М., 86

## **Ф**

Фаттахова З.Т., 54  
Федин В.П., 42  
Федоров Д.П., 91  
Федотов А.С., 49, 89  
Феськов С.В., 43  
Филимонова Л.В., 51  
Финкельштейн Е.Ш., 83  
Фирсин И.Д., 54, 79  
Фирсов Д.А., 44  
Фит Х.-М., 77  
Флид В.Р., 43, 69

## **Х**

Хабарова Е.И., 31

Хаджиев С.Н., 49, 54, 59,  
79, 84, 90  
Хаитов М.Р., 48  
Харитонов В.А., 43  
Харитонова П.Г., 89, 90  
Харламов В.Ф., 43  
Хатымов Р.В., 44, 80, 90  
Хомик С.В., 23, 38, 45, 77  
Хренова М.Г., 44  
Хуанг Й.Ч., 83

## **Ц**

Цветков Г.И., 67  
Цветкова Ю.Ю., 69  
Цодиков М.В., 26, 31, 34,  
45, 49, 61, 75, 76, 89

## **Ч**

Чайкин А.М., 33  
Чайкина Ю.А., 44  
Чакак А.А., 74  
Чвалун С.Н., 53, 60, 61,  
63, 73  
Черепанов А.А., 45  
Черепанова Т.Т., 45  
Черкашина Н.В., 41  
Чернавский П.А., 45, 67,  
80  
Чернова Е.М., 40  
Черныш В.И., 67  
Чистяков А.В., 34, 45, 49,  
61, 78  
Чудакова М.В., 59, 84, 90  
Чуканов Н.В., 64  
Чумакова Н.А., 26, 78, 90  
Чухманов Е.П., 75  
Чучелкин И.В., 92

## **Ш**

Шабанова Д.Д., 48  
Шамсиев Р.С., 43  
Шандрюк Г.А., 83  
Шаповалов С.С., 61  
Шаповалова О.В., 91, 92  
Шапочкина И.В., 91  
Шарипов Г.Л., 42  
Шастин А.В., 64  
Шаулов А.Ю., 86

Шашкин Д.П., 54  
Швыдкий В.О., 64, 92  
Шевелёв М.Д., 84  
Шерин П.С., 40  
Шершакова Н.Н., 48  
Шестаков А.Ф., 46, 88, 93  
Шипуло Е.В., 75  
Ширяев А.А., 92  
Шиянова К.А., 91, 92  
Шмыглева Л.В., 46  
Штамм Е.В., 63, 92  
Штерцер Н.В., 93  
Шуб Б.Р., 29, 33, 43, 58,  
59, 60, 81, 85

## **Щ**

Шугалей И.В., 87  
Шустов В.С., 89  
Шушин А.И., 46  
Щеголихин А.И., 52  
Щеголихин А.Н., 45  
Щукин А.С., 41  
Щукин П.В., 44, 90

## **Э**

Эзжеленко Д.И., 78  
Эренбург С.Б., 42, 47

## **Ю**

Юнусов М.П., 47, 78, 93  
Юрковская А.В., 77, 82  
Юрова И.Ю., 56, 72  
Юрьева Т.М., 93  
Юшкова Ю.В., 90

## **Я**

Яблокова М.Ю., 36  
Якушев И.А., 41  
Ялышев В.Ш., 93  
Ярмоленко О.В., 50, 88, 93



**Современная химическая физика**  
**XXIX Симпозиум**

Отпечатано ООО «Астра-полиграфия»  
Формат 60x90 1/16  
Тираж 300 экз. Заказ 72-7/2017  
Москва, ул. Полярная 33Б