

ТУАПСЕ 2014

Современная химическая физика

XXVI Симпозиум



сборник
аннотаций

20 сентября–1 октября, 2014 года
Пансионат «Маяк», г. Туапсе

ISBN 978-5-99-05743-2-8C

УВАЖАЕМЫЕ УЧАСТНИКИ XXVI СИМПОЗИУМА «СОВРЕМЕННАЯ ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»!

В двадцать шестой раз мы собираемся на Симпозиуме для того, чтобы обменяться научными новостями и узнать о новых достижениях коллег. Как и в предыдущем году сборнику тезисов 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, они также очень активно участвуют во всех программных мероприятиях. Приятно осознавать, что у Симпозиума есть 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 XXVI 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 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»

ОРГКОМИТЕТ

Председатель, Директор

проф. Шуб Б.Р

Председатель программного комитета.

акад Бучаченко А.Л.

Члены оргкомитета

акад. Алдошин С.М.
акад. Алфимов М.В.
акад. Берлин А.А.
чл.-корр. Гехман А.Е.
проф. Гордон Е.Б.
проф. Корчак В.Н.
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.
акад. Цветков Ю.Д.
проф. Цодиков М.В.
проф. Шушин А.И.

Уч. секретарь

Озерин С.А.

Уч. секретариат

Гатин А.К.
Кирсанкин А.А.
Костров А.Н.
Куркин Т.С.
Шарова М.В.

Конкурсная комиссия

Акад. Бучаченко А.Л.
проф. Корчак В.Н.
чл.-корр. Озерин А.Н.
проф. Трахтенберг Л.И.
проф. Товбин Ю.К.
акад. Цветков Ю.Д.
проф. Цодиков М.В.
проф. Шуб Б.Р.
Озерин С.А.

ПРОГРАММА СИМПОЗИУМА

20 СЕНТЯБРЯ, СУББОТА

Заезд участников. Регистрация.

21 СЕНТЯБРЯ, ВОСКРЕСЕНЬЕ

Утренняя сессия

Ведущий: проф. Шуб Б.Р.

10.00 Открытие Симпозиума

10.30 Гордон Евгений Борисович "Термическая стабильность структуры и формы нанопроволок"

11.10 Плахутин Борис Николаевич "Каноническая форма метода Хартри-Фока для систем с открытыми электронными оболочками"

Вечерняя сессия

Биохимическая физика

Ведущий: акад. Бучаченко А.Л.

16.00 Цветков Юрий Дмитриевич "PELDOR в исследованиях ДНК и РНК"

16.20 Зленко Дмитрий Владимирович "Частицы дисперсной фазы в растворах хиральных гелаторов"

16.40 Стовбун Сергей Витальевич "Экспериментальное преодоление катастрофы ошибок: формирование линейных гомохиральных супрамолекул макроскопической длины в среде, исходно слабо отклонившейся от рацемической"

17.00 Семенова Ирина Владимировна "Детектирование и мониторинг возбужденных биомолекул голографическими методами"

17.15 Ткачев Ярослав Владимирович "Модуляция кинетики миозина координированными двухвалентными ионами"

17.30 Трубина Светлана Владимировна "EXAFS-исследование соединения К-Ві-цитрат (Де-Нол) в твердой форме и водных растворах различной концентрации"

19.00 Фуршет

22 СЕНТЯБРЯ, ПОНЕДЕЛЬНИК

Утренняя сессия

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии

Ведущий: проф. Шуб Б.Р.

9.00 Трахтенберг Леонид Израйлевич "Сенсорные свойства наноструктурированных пленок на основе смешанных полупроводниковых металлоксидов"

9.40 Чернозатонский Леонид Александрович "Квазидвумерные материалы на основе дихалькогенидов: структуры, физико-химические свойства и приложения"

10.10 Бричкин Сергей Борисович "Нанокластеры полупроводниковых квантовых точек - новый объект нанофотоники"

10.25 Перерыв

10.35 Гатин Андрей Константинович "Взаимодействие водорода и кислорода на поверхности единичных наноструктур золота"

10.50 Буданов Борис Андреевич "Молекулярные органо-полиоксометаллатные диоды"

11.05 Павловец Георгий Яковлевич "Пути обеспечения качества наноконпонентов энергоёмких композитов"

11.20 Смирнов Вячеслав Александрович "Электропроводность пленок оксида графита"

11.35 Титков Александр Игоревич "Разработка и исследование токопроводящих чернил для струйной печати на основе наночастиц серебра"

11.45 Эренбург Симон Борисович "Характеристики малых кластеров золота в образцах, содержащих молекулы кукурбит[n]урилов ($n = 6, 7, 8$), по EXAFS спектрам"

12.00 Юхин Юрий Михайлович "Получение наночастиц серебра, меди и сплавов на их основе для электроники экстракционно-полиольным методом"

Вечерняя сессия

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии

Ведущий: проф. Трахтенберг Л.И.

16.00 Вайнер Борис Григорьевич "Тепловизионный метод в изучении динамики процессов адсорбционного взаимодействия молекул газа с твердыми телами"

16.30 Аронзон Борис Аронович "Ферромагнитные наноконпозиты"

16.50 Озерин Сергей Александрович "Структура и электрофизические свойства тонопленочных наноконпозитов на основе ароматических полимеров и полупроводниковых наночастиц хальклогенидов, синтезированных из газовой фазы"

17.05 Перерыв

17.10 Волков Владимир Тимофеевич "Холловские сенсоры на основе гибридного углеродного материала"

17.25 Данишевский Александр Моисеевич "Диамagnetизм, индуцированный адсорбцией никеля на углероде"

17.40 Харламов Владимир Федорович "Термоэлектрическая эффективность наноструктурированных материалов"

17.55 Харитонов Василий Анатольевич "Взаимодействие аммиака с борорганическими наночастицами, нанесенными на различные подложки"

18.10 Шабатина Татьяна Игоревна "Молекулярная организация и комплексообразование в гибридных металл-мезогенных наносистемах"

18.25 Ярмоленко Ольга Викторовна "Принципы создания твердых и пластифицированных нанокompозитных полимерных электролитов"

23 СЕНТЯБРЯ, ВТОРНИК

Утренняя сессия

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

1. Башкатова Елена Николаевна "Водная нанодисперсия фуллерена C₆₀ проявляет противовоспалительную активность в модели атопического дерматита на мышах"

2. Белоусов Сергей Иванович "Электрореологические жидкости на основе гидрозолей детонационных наноалмазов и суспензий монтмориллонитовых глин в полидиметилсилоксановых маслах"

3. Боровков Николай Юрьевич "Взаимодействие фталоцианин - фуллерен в контексте химии материалов"

4. Гак Владимир Юрьевич "Изучение эффектов коллективного взаимодействия в нанокластерах коллоидных квантовых точек CdSe"

5. Горшенев Владимир Николаевич "Механоакустическая активация процесса получения гидроксипатита"

6. Гребенщиков Юрий Борисович "Зависимость магнитной проницаемости от магнитного поля ленточного аморфного магнитного материала."

7. Гришин Максим Вячеславович "Влияние подложки на адсорбционные свойства единичных наночастиц золота"

8. Гришин Максим Вячеславович "Эффект подложки при каталитическом разложении аммиака борорганическими наночастицами"

9. Гудков Максим Владимирович "Газообразные продукты термического восстановления оксида графита при умеренных температурах"

10. Жилиева Елена Ивановна "Слоистые органические проводники на основе бис(этилендитио)тетрафлуоралена с анионами [CdBr₄]"

11. Завьялов Сергей Алексеевич "Влияние толщины полимерных пленок нанокомпозитов ППК+CdS на их электрические свойства и структуру поверхности"
13. Завьялов Сергей Алексеевич "Температурная зависимость проводимости пленок поли-пара-ксилилена с добавками наночастиц Fe"
14. Иванцов Михаил Иванович "Композиционные материалы на основе Fe и Co В ИК-пиролизованной полимерной матрице"
15. Ивичева Светлана Николаевна "Влияние размерного фактора на формирование фазы дититаната висмута со структурой пирохлора в порошках и упорядоченных 3D нанокомпозитах"
16. Ивичева Светлана Николаевна "Получение металлических и гетерометаллических наночастиц в опаловых матрицах при каталитическом дегидрировании изопропилового спирта в сверхкритических условиях"
17. Карелин Александр Иосафович "Нанокомпозиты на основе гидратированных оксидов олова и сурьмы: ИК спектры поглощения, строение"
18. Каюмов Руслан Рифатович "Перколяционная модель протонной проводимости каликсаренсульфокилот и фуллеренолов"
19. Кирсанкин Андрей Александрович "Адсорбция водорода на единичных наночастицах золота: эксперименты и моделирование"
20. Клецов Алексей Александрович "Управление целостностью нанокомпозитных микроструктур на основе липидов, полимеров и неорганических наночастиц в электрическом поле"
21. Клецов Алексей Александрович "Влияние электрического поля на формирование ленгмюровских монослоев жирной кислоты"
22. Колесников Денис Владимирович "Проводимость хиральных нанотрубок в приближении Дирака"
23. Колчина Анастасия Сергеевна "Взаимодействие тонкопленочных структур сплава палладия В1 с водородом"
24. Колчина Анастасия Сергеевна "Исследование пористых структур как подложек для сверхтонких палладиевых мембран"
25. Крутойаров Алексей Андреевич "Импедансное исследование сополимера метилового и этилового эфиров метакриловой кислоты с различными пропорциями добавления углеродных нанотрубок"
26. Лобова Наталья Анатольевна "Исследование спектральных свойств сольватохромных красителей в комплексах с циклодекстринами и в гелях"
27. Маркова Екатерина Борисовна "Влияние пропана на физико-химические свойства оксида алюминия."
28. Монахова Татьяна Вадимовна "Ингибиторные свойства графита в полипропилен-графитовых нанокомпозитах"
29. Невзорова Юлия Владимировна "Влияние внешних полей на распространение предельно коротких оптических импульсов в брэгговской среде с углеродными нанотрубками"
30. Некрасов Виктор Михайлович "Новые подходы к синтезу сажи с высоким содержанием высших фуллеренов"

31. Некрасов Виктор Михайлович "Гольмиевый эндодральный металлофуллерид $K(18\text{-crown-6})[Ho@C82]$ "
32. Никулина Ольга Сергеевна "Генезис фазового состава Mn-Ga и Mn-Fe оксидных систем при температурном воздействии"
33. Охлопкова Людмила Борисовна "Влияние состава Pd_xZn_{100-x} наночастиц на активность и селективность в реакции гидрирования 2-метил-3-бутин-2-ола"
34. Панкина Галина Викторовна "Оксиды железа и кобальта, диспергированные на активированных углях: размерный эффект."
35. Прокофьев Сергей Ильич "Влияние тепловых колебаний и анизотропии энергии дислокации в алюминии на тепловое движение связанных с ними нановключений жидкого свинца"
36. Пургина Дарья Дмитриевна "Получение водных дисперсий фуллерена C_{60} и анализ их структуры"
37. Пчёлкин Василий Петрович "Количественная оценка поведения координационных комплексов молекул ненасыщенных липидов с нанокластерами ионов серебра в условиях обращенно-фазовой жидкостной хроматографии"
38. Румянцев Борис Михайлович "Влияние магнитных наночастиц на фотоэлектрические и фотовольтаические характеристики полимерных композитов"
39. Садков Анатолий Петрович "Бимодальная функция распределения по размерам наночастиц Au, стабилизированных биофлавоноидами."
40. Сарвадий Сергей Юрьевич "Адсорбция молекулярного аммиака на нанокластерах платины и титана "
41. Свалова Анна Ивановна "Статистическое моделирование наночастиц некоторых металлов в области перехода от структуры с пятиосевой симметрией к кристаллической структуре"
42. Софич Дмитрий Олегович "Термохимическое преобразование тонких пленок фторида лития"
43. Судоргин Сергей Александрович "Транспортные характеристики полупроводниковых УНТ с адсорбированными атомами водорода"
44. Сыченко Диана Викторовна "Образование углеродных структур при термоллизе твердых отходов пластмасс"
45. Чашихин Олег Валентинович "Синтез квантовых точек CdS при помощи микроволнового нагрева."
46. Эренбург Симон Борисович "EXAFS- исследование комплекса $Bi(III)$ с 3-меркаптопропионовой кислотой (H_2MPA) в растворе $HClO_4$ и твердого комплекса Bi , содержащего (MPA)"
47. Юрьев Михаил Юрьевич "Влияние ионизации на упругие свойства однослойных углеродных нанотрубок: квантовохимическое исследование"
48. Бельтюкова Дина Михайловна "Исследование безызлучательных переходов при лазерной генерации синглетного кислорода в воде."
49. Жданова Елена Сергеевна "Теоретическое исследование структурных особенностей противомалерийных соединений"

50. Жигачева Ирина Валентиновна "Использование метода атомно-силовой микроскопии для исследования функционального состояния митохондрий"
51. Жигачева Ирина Валентиновна "Применение метода АСМ для изучения механизмов действия ферментов на модельных системах, содержащих краун-эфиры, и структурных элементов клетки"
52. Колганова Марина Николаевна "Исследование взаимодействия тиа- и оксакарбоцианиновых красителей с полимерами в растворах и в системах, содержащих магнитные наночастицы"
53. Куртикян Тигран Степанович "Взаимодействие молекулярного кислорода с нитрозильными комплексами мезо-моно-пиридил-три-арил-порфиринов кобальта(II)"
54. Летута Ульяна Григорьевна "Магнитные эффекты в бактериальных клетках E.coli"
55. Лысова Светлана Сергеевна "Определение констант ионизации амфолитов методом безбуферной спектрофотометрии"
56. Пищур Денис Петрович "Влияние растительных препаратов на свойства воды в нанопорах коллагена по данным ЯМР и калориметрии"
57. Проскуряков Иван Игоревич "Генерация триплетных состояний каротиноидов по механизму синглет-триплетного деления возбуждения"
58. Рыжкина Ирина Сергеевна "Влияние рентгеновского излучения в диапазоне доз, используемых при медицинских исследованиях, на самоорганизацию и свойства водных растворов ДНК"
59. Сажина Наталья Николаевна "Сравнение двух хемилюминесцентных моделей для клинического определения антиокислительной активности плазмы крови человека"
60. Сергеева Светлана Юрьевна "Поиск простых модельных систем для оценки влияния рентгеновского излучения на биологические объекты"
61. Старикова Татьяна Александровна "Определение констант ионизации никотиновой кислоты методом безбуферной спектрофотометрии"
62. Андреев Сергей Михайлович "Векторные конструкции на основе катионных пептидов для внутриклеточной доставки ДНК и РНК"
63. Буданов Борис Андреевич "Антивирусные и иммуномоделирующие свойства полиоксометаллатов Кеггина"
64. Зицерман Владимир Юрьевич "Систематизация данных по наноматериалам: онтологический подход"
65. Клецов Алексей Александрович "Расчеты поперечной проводимости нуклеотидных оснований ДНК подтверждают возможность их идентификации путем измерения тока через нуклеотиды при протягивании ДНК через нанопору"
66. Коноваленко Дмитрий Петрович "Физико-химические характеристики крови при развитии гемолитической анемии и введении наночастиц железа"
67. Костров Андрей Николаевич "Применение методов оптического манипулирования и фемтосекундной лазерной нанохирургии в доимплантационном развитии млекопитающих"

68. Максименко Ольга Олеговна "Изучение возможности радиационной стерилизации наносомальной формы доксорубицина на основе полилактида RESOMER 502H"

69. Елистратова Юлия Геннадьевна "Зондирование антибиотиков в водных растворах с помощью супрамолекулярных ансамблей триблоксополимеров с гексаядерным кластером молибдена"

70. Багаева М.И. "Зона дермо-эпидермального контакта кожи человека в разные возрастные периоды"

71. Сафронов Д.Ю. Молекулярные основы биологической активности и фармакологических свойств противовирусного препарата «Панавир»

Вечерняя сессия

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии

Ведущий: проф. Гордон Е.Б.

16.00 Кожевин Владимир Михайлович "Измерение зарядового состояния аморфных металлических наноструктур на проводящем носителе."

16.20 Вальнюкова Анастасия Сергеевна "Получение и изучение кристаллической структуры наноструктурированных порошков системы никель-кадмий"

16.35 Волкова Нина Николаевна "Связь размера, формы и массовой доли частиц серебра с активационными параметрами катализа термодеструкции поликарбонатных металлокомпозигов"

16.50 Исупов Виталий Петрович "Механохимический синтез высокодисперсного наноструктурированного гамма-моноалюмината лития для электрохимической энергетики"

17.05 Перерыв

17.10 Лебедева Ольга Сергеевна "Пьезопроводимость хиральных углеродных нанотрубок"

17.25 Маковийчук Мирослав Иванович "Перспективы импульсной фликкер-шумовой спектроскопии"

17.40 Чайкина Юлия Александровна "Флуктуационный механизм наноконденсации в сверхкритическом CO₂"

17.55 Борщ Надежда Алексеевна "Компьютерное моделирование элементов для конструирования одномерных наноструктур на основе кремния"

24 СЕНТЯБРЯ, СРЕДА

Утренняя сессия

Гомогенный и гетерогенный катализ

Ведущий: проф. Корчак В.Н.

9.00 Цодиков Марк Вениаминович "Катализ перспективный в производстве биотоплив"

9.40 Арутюнян Аркадий Беньяминович "Низкотемпературные химические транспортные реакции"

9.55 Гаврилов Константин Николаевич "Фосфорсодержащие лиганды на основе органокализаторов как высокоэффективные хиральные индукторы для металлокомплексного катализа"

10.10 Зенковец Галина Алексеевна "Влияние состояния и распределения ионов меди в Cu/ZSM-5 на каталитические свойства в реакции селективного восстановления NO пропаном."

10.25 Перерыв

10.40 Исмаилов Этибар Гумбат "Исследование конверсии адсорбированного на Fe-Zr/ γ -Al₂O₃ этанола сочетанием методов ТГ/ДСК и ГХ/МС"

10.55 Кошевой Евгений Игоревич "Исследование процессов формирования активных центров нанесенных титанмагниевого катализаторов полимеризации олефинов"

11.10 Чистяков Андрей Валерьевич "Pt-содержащие катализаторы в процессах переработки продуктов биомассы"

Вечерняя сессия

Гомогенный и гетерогенный катализ, химическая физика поверхности

Ведущий: проф. Цодиков М.В.

15.30 Флид Виталий Рафаилович "Парамагнитные комплексы никеля в каталитических реакциях формирования и разрыва C-C-связи"

15.45 Кулаковская Светлана Ивановна "Электрохимическое и ЭПР исследование механизма окисления феназин-ди-N-оксида в присутствии изопропанола на электродах из стеклоуглерода и одностенных углеродных нанотрубок"

16.00 Охлопкова Людмила Борисовна "Разработка наноструктурированных каталитических покрытий на внутренней поверхности капиллярного микрореактора для селективного гидрирования ацетиленовых спиртов"

16.15 Сальников Олег Георгиевич "Новые подходы к генерированию и применению индуцированной параводородом поляризации ядер при использовании гетерогенных каталитических систем"

16.30 Столяров Игорь Павлович "Новые перфторкарбоксилатные комплексы платины(4+) - катализаторы окислительной этерификации алканов"

16.45 Федотов Алексей Станиславович "Получение синтез-газа газа и водорода методом углекислотного и парового риформинга метана и

продуктов ферментации на пористых керамических Ni-Co-содержащих мембранах"

17.00 Перерыв

17.10 Юнусов Мирахмад Пулатович "Новые каталитические системы для процессов гидроочистки и деароматизации нефтяных фракции"

17.25 Бедило Александр Федорович "Характеризация электроноакцепторных центров поверхности в ходе каталитических и топохимических реакций"

17.40 Гаврилов Владимир Юрьевич "Адсорбционное взаимодействие H₂ с алюмофосфатными цеолитами AIPO"

17.55 Калинин Александр Васильевич "Исследование взаимодействия NO₂ с модельными образцами Au/C методом РФЭС."

18.10 Смирнов Михаил Юрьевич "Особенности формирования смешанных адсорбционных слоев на поверхности металлов с участием простых молекул"

18.25 Харламов Владимир Федорович "Поляризация мелкодисперсных диэлектриков при хемосорбции водорода"

25 СЕНТЯБРЯ, ЧЕТВЕРГ

Утренняя сессия

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

1. Белашов Андрей Владимирович "Развитие методов цифровой голографии для детектирования синглетного кислорода"

2. Беляев Сергей Николаевич "Свойства и структура кластеров Mg₂-Mg₃₂ и их взаимодействие с EtBr в вакууме"

3. Боженко Константин Викторович "Синтез, структура и свойства новых представителей семейства каликс[4]аренсодержащих [MnII₂ MnIII₂] кластеров"

4. Варфоломеева Вера Васильевна "Слабые водородные связи в адсорбции нежестких молекул ароматических спиртов и аминов"

5. Витковская Надежда Моисеевна "Электронная структура и таутомерия производных цитозина по данным квантовохимических пропагаторных расчетов и фотоэлектронной спектроскопии"

6. Водолазкина Дарья Александровна "DFT моделирование реакции окисления диметилсульфида пероксосоединениями"

7. Гатауллин Артур Расыхович "Квантовохимическое изучение влияния молекулярной динамики на структуру и константы ядерного магнитного экранирования гетероциклических молекул"

8. Ковальчукова Ольга Владимировна "Квантово-химическое моделирование молекулярного и электронного строения N-замещенных N-нитрозогидроксиламинов и их металлокомплексов"

9. Кудашов Александр Дмитриевич "PbF: к поиску вариаций фундаментальных постоянных"
10. Ларионова Елена Юрьевна "Квантовохимическое исследование механизма начальной стадии стереоселективной сборки 2,3,4 - триметил - 7 - метилен - 1,5 - ди(тиофен - 2 - ил) - 6,8 - диоксабицикло[3.2.1] октана"
11. Ларионова Елена Юрьевна "Квантовохимическое исследование присоединения воды и сероводорода к ацетилену в суперосновной среде КОН/DMSO"
12. Орлов Юрий Дмитриевич "Электронное строение полинитрометанов"
13. Охупкин Андрей Игоревич " Механизм гидросилилирования бензальдегида диметилсиланом на силиламидном комплексе (ArN=)2[tBu(Me2HSi-)N]MoH"
14. Охупкин Андрей Игоревич "Квантово-химическое исследование адсорбции кислорода на чистых и легированных кластерах золота"
15. Петров Александр Николаевич "Исследование эффекта Зеемана в молекуле ThO для поиска электрического дипольного момента электрона"
16. Пичугина Дарья Александровна "Влияния структурной организации кластеров золота на адсорбцию этилена, ацетилена, водорода, кислорода и монооксида углерода"
17. Ростовщикова Татьяна Николаевна "Квантово-химическое описание комплексов M-L (M = Ni, Pt, Pd, L = H2, C2H2, C2H4, CO, O2)"
18. Скрипников Леонид Владимирович "Теоретическое исследование молекулы ThO для поиска электрического дипольного момента электрона"
19. Туровцев Владимир Владимирович "Термодинамических свойств газообразных лактонов в интервале 298-1500 K"
20. Утенышев Андрей Николаевич "Характерные особенности строения семичленного цикла в β – трополонах"
21. Чельцов Владислав Федорович "Излучение суперпозиционного состояния резонансного фотона двухуровневым атомом в одномерном сверхдобротном нанорезонаторе"
22. Шестаков Александр Федорович "Применение методов теории функционала плотности для изучения строения и люминесцентных свойств N,O-хелатированных гомолептических комплексов редкоземельных металлов."
23. Афоничева Ольга Владимировна "Модификация поверхности сверхвысокомолекулярного полиэтилена сверхкритическим CO2"
24. Белоусов Сергей Иванович "Электроформование нетканых материалов из расплава полиамида-6 с добавками стеаратов магния, кальция и цинка"
25. Бревнов Петр Николаевич "Влияние нанопластинок графита на процессы пиролиза, термоокислительной деструкции и горения полиэтилена"
26. Бузин Александр Игоревич "Исследование кинетики полимеризации п-ксилилена в процессе криохимического синтеза"
27. Бузин Михаил Игоревич "Некоторые аспекты термической деструкции полиметилиденфталата"
28. Бусыгина Елена Андреевна "Электрет на основе полимерного композита"

29. Гаврилов Юрий Алексеевич "Синтез, структура и свойства органоминеральных сорбентов."
30. Гордон Диляра Ахметовна "Процессы, протекающие при низкотемпературном действии молекулярного брома на акриламид"
31. Гулмуродов Каримзон Саидович "Гидротриоксид циклогексанола как инициатор радикальной полимеризации"
32. Долгова Алла Анатольевна "Особенности формирования и коллапса нанопористой структуры крейзов при деформировании волокон стеклообразного ПЭТФ в физически активных жидких средах"
33. Заболотнов Александр Сергеевич "Синтез нанокомпозитов на основе СВМПЭ и монтмориллонита с применением катализаторов циглеровского типа"
34. Калинина Ирина Георгиевна "Отличительные свойства гидропероксидов этилена в его сополимерах с различными реакционноспособными группами"
35. Кочервинский Валентин Валентинович "Влияние на электрофизические свойства фторсодержащих полимеров физико-химических изменений в их поверхности при напылении на них различных металлов"
36. Куприянов Михаил Юрьевич "Взаимосвязь механизмов фото- и газочувствительности композитных нанопленок на основе сложных оксидов олова и титана"
37. Лукша Рима Сергеевна "Водопоглощающие свойства сополимера диаллидиметиламмоний хлорида и акриламида"
38. Махаев Виктор Дмитриевич "Твердофазный механохимический синтез комплексов циркония, ванадия и хрома с О,О-лигандами и исследование их каталитических свойств в реакциях полимеризации и сополимеризации этилена"
39. Мещанкина Марина Юрьевна "Сравнительный анализ самоорганизующихся систем на основе полиметакрилатов и хиральных дипептидов с объемными заместителями в твердом состоянии и в растворе"
40. Митряева Наталья Сергеевна "Моделирование механических свойств цис-изопренового каучука и композиций на его основе"
41. Мокрушин Анатолий Дмитриевич "Корреляция между электропроводностью и содержанием кислотных остатков в порошках полианилина"
42. Монахова Кристина Зурабовна "Придание пластичности хрупким гетерогенным полимерным системам путем двухосной ориентации в металлической матрице."
43. Мороз Николай Клавдиевич "Обмен "гость-хозяин" в металлоорганическом полимере $[Zn_2(bdc)(S\ lac)(dmf)]\ dmf$ "
44. Нежный Пётр Александрович "Влияние дисперсного состава алюминия на теплопроводящие и диэлектрические свойства металл-полимерных композиционных материалов"
45. Польщиков Сергей Владимирович "Влияние углеродных нанонаполнителей на комплекс свойств синдиотактического полипропилена"

46. Похарукова Юлия Евгеньевна "Синтез лактида в присутствии п-толуолсульфокислоты"
47. Родин Виктор Михайлович "Стохастическое представление модели Колемана-Фокса при описании последовательностей стереохимических конфигураций"
48. Родин Виктор Михайлович "Значение кинетического моделирования реакционной способности концевых радикальных фрагментов растущих макроцепей сополимеров при исследовании их микроструктуры"
49. Харламов Андрей Андреевич "Сравнительный анализ структуры и фазового поведения карбоксилановых дендримеров с фрагментами α, α' -диалкилкватротиофена"
50. Щербина Максим Анатольевич "Структура и фазовое поведение смесей самоорганизующихся секторообразных дендронов и виологена"
51. Ярмоленко Ольга Викторовна "Зависимость проводящих свойств полимерного электролита ДАК-ПЭГ - LiBF_4 - ионная жидкость (BMIBF_4 и EMIBF_4) от состава"
52. Голубев Евгений Константинович "Структура и свойства ориентированных пленок сверхвысокомолекулярного полиэтилена, полученных методом твердофазного непрерывного формования"
53. Озеров Георгий Константинович "Определение констант скоростей реакций с участием ридберговских состояний атомов и молекул. диффузионный подход"
54. Чапурина Анастасия Владимировна "Особенности сополимеризации пропилена с метилвинилкетонем в массе пропилена"

Вечерняя сессия

Квантовая химия

Ведущий: проф. Плахутин Б.Н.

- 15.30 Волохов Вадим Маркович "GRID технологии и вычислительная химия"
- 16.00 Загуляев Сергей Николаевич "Волновая функция антиферромагнитного состояния"
- 16.20 Голубева Елена Николаевна "Квантово-химический расчет спектральных параметров комплексов меди как метод определения их состава и строения"
- 16.35 Игнатов Станислав Константинович "Диссоциативная адсорбция водорода на кластере Pt_{25} в вакууме и его реакции с адсорбированными непредельными альдегидами"
- 16.50 Шестаков Александр Федорович "Обобщённое соотношение Поляни-Семёнова."
- 17.05 Титов Анатолий Владимирович "Метод релятивистского псевдопотенциала для расчета молекул, кластеров и твердых тел с тяжелыми атомами: почему он работает?"

17.20 Перерыв

17.30 Овчинников Михаил Юрьевич "Распад тетраоксанов: квантово-химическое исследование механизма реакции"

17.45 Поляков Игорь Вадимович "Моделирование компонентов солнечных элементов, сенсibilизированных красителем, с помощью современных методов квантовой химии"

18.00 Круглов Степан Александрович "Моделирование эндодральных комплексов актиний-фуллерен при помощи релятивистской теории функционала плотности"

18.15 Яржемский Виктор Георгиевич "Структура и электронное строение наночастиц золота"

18.30 Голубев Владимир Константинович "Механизмы и энергетика разложения N-бис-полифункционально замещенных N-нитрамино"

18.45 Борщ Надежда Алексеевна "Электронная структура и проводимость в Pt-замещенных клатратных силицидах"

26 СЕНТЯБРЯ, ПЯТНИЦА

Утренняя сессия

Кинетика и динамика химических реакций, элементарные процессы

Ведущий: проф. Флид В.Р.

9.00 Товбин Юрий Константинович "Локально неравновесные молекулярные процессы переноса в разных агрегатных состояниях"

9.40 Киселёв Владимир Дмитриевич "Влияние давления и температуры на изменение плотности и пермиттивности молекулярных жидкостей"

10.10 Лукова Галина Викторовна "Тонкие взаимодействия регулируют триплетный перенос энергии"

10.30 Перерыв

10.35 Никитин Алексей Витальевич "Газофазный окислительный крекинг легких алканов как основа альтернативного GTL-процесса"

10.50 Плисс Евгений Моисеевич "Кинетическое исследование и моделирование окисления метиллинолеата в мицеллах"

11.05 Рогозина Марина Викторовна "Кинетика сверхбыстрого фотоиндуцированного переноса электрона из второго возбужденного состояния"

11.20 Юданов Владислав Васильевич "Сверхбыстрая динамика разделения заряда в супрамолекулярных донорно-акцепторных системах"

11.35 Асфандиаров Наиль Лутфурахманович "Оценка величины сродства к электрону из данных о средних временах жизни отрицательных ионов"

11.50 Лаврик Николай Львович "Определение констант связывания гуминовых кислот с ионами металлов методом абсорбции"

Вечерняя сессия

Высокомолекулярные соединения

Ведущий: к.ф.-м.н. Озерин С.А.

15.30 Щербина Максим Анатольевич "Высокоупорядоченные пленки Лэнгмюра-Блоджетт на основе α,α' -диалкилкватротиофена и его силоксановых димеров: новые перспективные материалы для органической электроники"

15.50 Григорьев Тимофей Евгеньевич "Полимерные носители клеточных культур"

16.05 Кулебякина Алевтина Игоревна "Самоорганизация амфифильных блок-сополимеров на основе кристаллизующегося поли-L-лактида и полиэтиленоксида"

16.20 Мещанкина Марина Юрьевна "Биоразлагаемые смеси, полученные *in situ* сополимеризацией полилактида и полиамида-6"

16.35 Иванов Павел Леонидович "Синтез, свойства, а также способы оценки эффективности и безопасности инъекционных препаратов для лечения остеоартритов."

16.50 Старчак Елена Евгеньевна "Надмолекулярная структура и механические свойства реакторных смесей на основе СВМПЭ и сополимеров этилен/гексен-1."

17.05 Перерыв

17.15 Озерин Александр Сергеевич "Закономерности образования частиц галогенидов серебра на основе комплексов полиэлектролит - ион серебра в водных растворах."

17.30 Куркин Тихон Сергеевич "Эффективное повышение взаимной комплементарности полимерных волокон и термореактивных связующих как результат их одновременной модификации заряженными высокодисперсными частицами алмазной шихты"

17.45 Тикунова Екатерина Петровна "Закономерности образования сшитой структуры в нанокompозитных связующих на основе термореактивных эпоксидных смол и наноалмазной шихты"

18.00 Кечекьян Александр Степанович "Образование кавитационной шейки при вытяжке полимеров"

18.15 Барабанов Артем Александрович "Полимеризация этилена на титанмагниевого катализаторах: исследование кинетики по данным о числе и реакционной способности активных центров"

18.30 Михайлик Елена Сергеевна "Особенности релаксационного поведения ориентированных полимеров, полученных методом деформирования в металлической матрице"

18.45 Наумкин Александр Васильевич "Исследование свойств композиции СВМПЭ + α -токоферол"

27 СЕНТЯБРЯ, СУББОТА

Утренняя сессия

10.00 Стендовая сессия № 3 (гомогенный и гетерогенный катализ, кинетика и динамика химических реакций, химическая физика поверхности)

1. Антонов Дмитрий Олегович "Гибридный мембранно-каталитический реактор для совместного получения синтез-газа и ультрачистого водорода в процессах углекислотного риформинга метана и этанола"

2. Бегларян Айка Александрович "Получение биологически активных систем с помощью низкотемпературного химического переноса веществ"

3. Бедило Александр Федорович "Роль кислородных радикалов в реакции окислительного дегидрирования пропана на поверхности VOx/TiO₂ катализаторов"

4. Берестнева Юлия Васильевна "Комплексообразование гидропероксидов с бромидом тетраалкиламмония"

5. Гаврилов Владислав Константинович "Катализируемое палладием конструирование четвертичного асимметрического атома углерода"

6. Губанов Михаил Александрович "Золотосодержащие катализаторы в процессах конверсии этанола"

7. Жарова Полина Александровна "Реакция кросс-конденсации биооксигенатов в присутствии гетерогенных катализаторов"

8. Жеглов Сергей Викторович "Палладиевые каталитические системы в процессах получения предшественников биоактивных препаратов"

9. Загайнов Игорь Валерьевич "Новые катализаторы на основе диоксида церия для применения в реакциях с участием кислорода"

10. Каюмов Руслан Рифатович "Протонная проводимость допированных мембран Nafion®, при отрицательных температурах"

11. Кенжин Роман Мугарамович "Исследование электрооакцепторных центров в ходе каталитического дегидрохлорирования 1-хлорбутана на нанокристаллическом MgO"

12. Кенжин Роман Мугарамович "Изучение активных центров (Pd-Rh)/Al₂O₃ катализаторов методами ЭПР-спектроскопии и фотолюминесценции"

13. Константинов Григорий Игоревич "Изучение активности, селективности и эволюции катализатора парового реформинга метана, устойчивого к H₂S"

14. Коэмец Егор Геннадьевич "In situ исследование методом порошковой рентгеновской дифракции влияния ионов Al^{3+} на восстановление оксида кобальта"
15. Мамонтов Григорий Владимирович "Влияние природы носителя на состояние нанесённого хрома и активность в реакции дегидрирования парафиновых углеводородов"
16. Мусич Павел Григорьевич "Превращение синтез-газа в диметиловый эфир на смешанных катализаторах"
17. Новиков Иван Михайлович "Первый лиганд фосфитной природы на основе ((4R,5S)-5-(гидроксиметил)-2,2-диметил-1,3-диоксалан-4-ил)дифенилметанола"
18. Османова Севиндж Насиб "Парамагнитные комплексы в каталитических системах метатезиса олефинов на основе моно-, би- и гексаядерных соединений рения по данным спектроскопии ЭПР"
19. Петрова Лариса Александровна "Механохимический синтез тетракис(пентафторфенил)боратов трифенилметилия и трифенилциклопропенилия и тестирование их каталитических свойств в реакциях полимеризации этилена"
20. Ростовщикова Татьяна Николаевна "Влияние структурной организации металлов на активность синергетических катализаторов окисления и гидрирования"
21. Ростовщикова Татьяна Николаевна "Активность кластеров Au и Ni, сформированных методами лазерной электродисперсии, ионного обмена и пропитки, в окислении CO"
22. Сименцова Ирина Ивановна "Влияние среды на формирование оксидной структуры Co-Al катализаторов синтеза Фишера-Тропша"
24. Смирнов Михаил Юрьевич "Состояние окисления частиц нанесенной Pt при взаимодействии модельных NSR катализаторов с NO_2 "
25. Смирнов Михаил Юрьевич "Влияние состава реакционной среды и природы носителя на термическую стабильность наночастиц золота на поверхности оксидов"
26. Флид Виталий Рафаилович "Физико-химические основы каталитических процессов с участием норборнадиена"
27. Черепанова Светлана Витальевна "Новые высокоактивные в видимом диапазоне фотокатализаторы на основе $Cd_{1-x}Zn_xS/Zn(OH)_2$ для выделения водорода из водных растворов этанола"
28. Чудакова Мария Владимировна "Формирование Fe- и Co-содержащих каталитических суспензий для синтеза Фишера-Тропша in situ в реакционной среде"
29. Чучелкин Илья Валерьевич "Новые P,N-бидентатные лиганды на основе NOBIN как стереоселекторы в Pd-катализируемых асимметрических превращениях"
30. Штейнман Альберт Александрович "Подход к химическому моделированию метанмонооксигеназы"

31. Штерцер Наталья Владимировна "Исследование фазовых превращений в процессе приготовления делафоссита CuAlO_2 "
32. Шувараква Екатерина Игоревна "Характеризация электроноакцепторных центров на поверхности сульфатированного оксида алюминия методом ЭПР"
33. Бегларян Аик Александрович "Влияние структурных особенностей SiO_2 на гидротермальный синтез силикатов кальция"
34. Белых Софья Игоревна "Изучение закономерностей нитрования имидазола"
35. Дохликова Надежда Владимировна "Моделирование взаимодействия водорода с нанокластерами золота"
36. Захаров Виктор Владимирович "Изотермическая кинетика обратимых фазовых превращений $\alpha - \beta$ и $\beta - \alpha$ в 1,1-диамино-2,2-динитроэтилене"
37. Казак Владислав Олегович "Влияние природы носителя на процесс активации железо-нанесенных катализаторов"
38. Корнилов Дмитрий Анатольевич "Новый метод определения объема активации и объема реакции"
39. Корнилов Дмитрий Анатольевич "4-фенил-1,2,4-триазаолин-3,5-дион в еновых реакциях с циклогексеном, гексеном-1 и 2,3-диметил-2-бутеном"
40. Лукша Рима Сергеевна "Кинетика распада персульфата аммония"
41. Ляпунова Мария Вячеславовна "Нитрование имидазола и его производных"
42. Плисс Роман Евгеньевич "Роль гидропероксидных радикалов в процессе ингибированного окисления непредельных соединений"
43. Плисс Евгений Моисеевич "Роль алкоксиаминов и гидроксилламинов в процессе ингибированного нитроксильными радикалами окисления стирола"
44. Потапова Любовь Николаевна "Влияние давления на скорость реакции Дильса-Альдера диэтилазодикарбоксилата с 9,10-диметилантраценом."
45. Леднев Сергей Николаевич "Экспериментальное исследование и моделирование суперпозиции полярных эффектов при окислении непредельных соединений"
46. Теплов Олег Алексеевич "Экспериментальное и модельное исследование кинетики сушки и восстановления гидрооксидов железа"
47. Товбин Юрий Константинович "Влияние колебаний на термодинамические параметры равновесия кристалл - пар и жидкость - пар в леннард-джонсовской системе"
48. Товбин Юрий Константинович "Расчет колебательных движений адсорбата в аморфном состоянии жидкости в ходе диффузионной релаксации системы при пониженных температурах"
49. Ульянов Алексей Владимирович "Разложение физиологически активных высокотоксичных компонентов жидких ракетных топлив на поверхности кремнезема"
50. Фатхутдинов Альберт Равилевич "Анализ влияния природы растворителя на скорость реакции третичных фосфинов с непредельными карбоновыми кислотами на основе принципа линейности свободных энергий"

51. Фатхутдинов Альберт Равилевич "Эффект анхимерного содействия в реакции третичных фосфинов с непредельными карбоновыми кислотами"
52. Акименко Сергей Сергеевич "Компьютерное моделирование адсорбционного монослоя цис-кربоксифенил замещенного порфирина на поверхности Au(111)"
53. Болотов Василий Александрович "Влияние СВЧ излучения на процесс твердофазной активации гиббсита и свойства получаемых продуктов"
54. Грасс Владислав Эвальдович "Модифицирование порошков карбида титана путём силицирования в газовой атмосфере SiO"
55. Магаев Олег Валерьевич "Модификация углеродных сорбентов путем ступенчатого мягкого окисления"
56. Мокрушин Анатолий Дмитриевич "Позитронная микродефектоскопия процесса спекания керамики из нитрида бора"
57. Простнев Александр Сергеевич "Диффузия примесей в поверхностном слое твердого тела с гексагональной структурой"
58. Ракитин Владимир Валерьевич "Исследование влияния условий отжига на свойства тонких пленок Cu-Zn-Sn-S, полученных методом PVD"
59. Ростовщикова Татьяна Николаевна "Исследование поверхности синергетического Au-Cu катализатора методом инфракрасной спектроскопии адсорбированного CO"
60. Ростовщикова Татьяна Николаевна "Особенности электронного строения и морфологии синергетических катализаторов на основе Au-Ce, Au-Cu, Pd-Ce, Pd-Cu и Au-Ni"
61. Свиридова Лиана Николаевна "Адсорбция кукурбит[5]урилы на межфазной границе электрод/электролит"
62. Тухконен Любовь Матвеевна "Влияние химической обработки на фазовый состав поверхности и электрофизические характеристики барьеров Шоттки на высокоомном кремнии"
63. Чоба Мария Алексеевна "Особенности кинетических эффектов поверхностной сегрегации атомов кадмия на границе механически обновляемого электрода из сплава Ag-Cd с раствором поверхностно неактивного электролита"
64. Шуваракова Екатерина Игоревна "Роль электроноакцепторных центров в процессах деструктивной сорбции CF₂Cl₂ на нанокристаллических MgO и VO_x/MgO"
65. Калинин Александр Петрович "О влиянии крутизны отталкивательного потенциала взаимодействия атомных частиц на ход упругого дифференциального сечения рассеяния на малые углы"
66. Калинин Александр Петрович "Особенности микроскопического подхода к изучению свойств вещества"
67. Калинин Александр Петрович "Функциональное описание межатомных короткодействующих потенциалов, определяемых по данным рассеяния молекулярных пучков"
68. Калинин Александр Петрович "Возможности изучения процессов горения и взрыва с помощью дистанционного гиперспектрального зондирования"

Вечерняя сессия

Фотохимия и радиационная химия, химическая радиоспектроскопия

Ведущий: проф. Кожушнер М.А.

15.30 Васютинский Олег Святославович "Обнаружение и исследование спин-поляризованных атомов водорода, образующихся в фотохимических реакциях"

16.00 Лукова Галина Викторовна "Необычные свойства возбужденных состояний ПЗЛМ"

16.30 Будыка Михаил Федорович "Процессы переноса энергии в бихромофорных стирилхинолиновых диадах"

16.45 Иванов Анатолий Иванович "Влияние магнитного поля на квантовые выходы флуоресценции эксиплексов и флуорофоров"

17.00 Лобанов Антон Валерьевич "Надмолекулярная фотохимия тетрапирролов"

17.15 Перерыв

17.20 Лобова Наталья Анатольевна "Краунсодержащие стироловые красители с аммонийными заместителями: димеризация и стереоспецифическое [2+2]-фотоциклоприсоединение"

17.35 Поздняков Иван Павлович "Фотохимия комплексов Fe(III) с производными салициловой кислоты"

17.50 Барская Ирина Юрьевна "Светоиндуцированные магнитные аномалии в молекулярных магнетиках на основе меди и нитроксильных радикалов"

18.05 Барский Данила Андреевич "Развитие приложений ЯМР и МРТ на основе индуцированной пароводородом поляризации ядер"

18.20 Машковцев Рудольф Иванович "E" центры в α -кварце"

18.35 Дьяков Юрий Алексеевич "Фотодиссоциация индол-карбоксальдегидов под действием УФ-излучения: экспериментальное и теоретическое исследование"

28 СЕНТЯБРЯ, ВОСКРЕСЕНЬЕ

Утренняя сессия

Горение и взрыв

Ведущий: к.т.н. Хомик С.В.

9.00 Медведев Сергей Павлович "Визуализация и интерпретация низкотемпературного самовоспламенения водородсодержащих смесей при высоком давлении"

9.30 Смыгалина Анна Евгеньевна "Воспламенение водородо-воздушной смеси вблизи нижнего концентрационного предела"

09.45 Тереза Анатолий Михайлович "Исследование реакций инициирования H_2/O_2 в ударных волнах"

10.00 Зиборов Вадим Серафимович "Экспериментальное исследование распространения ударной волны в гелии, разбавленном Хе"

10.15 Мееров Дмитрий Борисович "Исследование процесса агломерации бора при горении в энергетических конденсированных системах"

10.30 Перерыв

10.40 Кислов Владимир Михайлович "Экспериментальное изучение неустойчивости фронта сверхадиабатического горения"

10.55 Мохин Григорий Николаевич "О механизме воспламенения и потухания очагов при горении гомогенных порохов"

11.10 Горшков Владимир Алексеевич "Влияние геометрических параметров исходных образцов на процесс "жидкофазного" горения смесей термитного типа в условиях давления газовой среды."

11.25 Кочетков Роман Александрович "Исследование влияния влажности на закономерности горения и фазовый состав порошковых и гранулированных смесей $TI+0.5C$ "

Вечерняя сессия

Горение и взрыв

Ведущий: д.ф.-м.н. Медведев С.П.

16.00 Хомик Сергей Викторович "Последствия взаимодействия ударных волн с неплоскими поверхностями в водородсодержащих смесях"

16.15 Максимова Ольга Геннадьевна "Передача нестационарной ударно-волновой нагрузки через насыпной материал"

16.30 Якушев Владислав Владиславович "Использование метода высокотемпературного ударного сжатия для получения фазы высокого давления нитрида кремния"

16.45 Жуков Андрей Николаевич "Превращение моноклинного диоксида циркония в метастабильную тетрагональную модификацию при ударно-волновом воздействии"

17.00 Перерыв

17.15 Голубев Владимир Константинович "Физико-химические и детонационные свойства и взрывное действие нескольких новых мощных взрывчатых нитратов"

17.30 Смирнов Константин Львович "Получение гетеромодульных керамических композитов на основе сиалонов в процессе фильтрационного горения"

17.45 Ковалев Иван Дмитриевич "Особенности формирования кристаллической структуры алюминида никеля в условиях СВС"

18.00 Милосердов Павел Александрович "Исследование процесса горения и закономерностей автоволнового синтеза литой оксидной керамики $Al_2O_3-Cr_2O_3 \times ZrO_2$ "

29 СЕНТЯБРЯ, ПОНЕДЕЛЬНИК

Утренняя сессия

10.00 Стендовая сессия № 4 (элементарные процессы, фотохимия и радиационная химия, химическая радиоспектроскопия, горение и взрыв)

1. Лаврик Николай Львович "Влияние перекристаллизации воды на её диэлектрическую проницаемость, вязкость и состояние Н-связей"

2. Летута Александр Сергеевич "Химический "anti-Zeno" эффект-новый механизм спинового катализа в радикальных триадах (R1,R2,R3)"

3. Пичугина Екатерина Сергеевна "Проявление геометрической фазы Берри в двухспиновых системах"

4. Потапова Любовь Николаевна "Влияние растворителя на парциальный мольный объем и энтальпию растворения ферроцена."

Аксенова Юлия Викторовна "Фотоника ряда комплексов дипирролилметенов"

5. Будыка Михаил Федорович "Синтез, спектрально-люминесцентные и фотохимические свойства ковалентно-связанных диад на основе 2-стирилхинолина и 6-гидрокси-2-нафтойной кислоты"

6. Втюрина Дарья Николаевна "Спектральные свойства и ИК-люминесценция примеси иона Bi^{+} в кристалле $CsCdCl_3$ "

7. Гапанович Михаил Вячеславович "Синтез фоточувствительных пленок $Cd_{1-x}Mg_xTe$ методом вакуумного напыления прекурсоров с последующим отжигом в активной атмосфере (PVD)"

8. Зицерман Владимир Юрьевич "Солнечные элементы на основе наноуглерода"

9. Кошкин Александр Викторович "Исследование фотофизических свойств органических красителей и их супрамолекулярных комплексов в силикатных гелях"

10. Ли Виталий Моисеевич "Фотохимические и люминесцентные свойства замещенных 3-стирилбензо[f]хинолинов"

11. Мамыкин Александр Васильевич "Образование электронно-возбужденных интермедиатов ксенона и кислорода при твердофазном разложении дифторида ксенона на поверхности силикагеля."

12. Николаева Валентина Викторовна "Радиолиз эскулина и эскулетина в спиртовых растворах"
13. Остахов Сергей Станиславович "Фотофизика и фотохимия кристаллического 5 фторурацила"
14. Поташова Наталья Игоревна "Реакции фотоизомеризации и фотоциклоприсоединения в бис-стирилхинолиновой диаде с о-ксилиленовым мостиком"
15. Сазонов Сергей Константинович "Фотопроцессы в димерных комплексах мезо-алкилкарбоцианиновых красителей с кукурбит[7]урилом"
16. Сафаров Фарит Эрикович "Хемилюминесценция биологически важных молекул: фармакологически перспективные пероксиды и синглетный кислород"
17. Смоленцев Артем Борисович "Исследование фотохромных и флуоресцентных свойств диарилэтенон и хроменон, содержащих производные диметиланилина"
18. Тухбатуллин Адис Анисович "Тушение триболоминесценции сульфатов лантанидов в атмосфере многоатомных газов"
19. Чашихин Олег Валентинович "Синтез, спектральные и фотохимические свойства гибридных органо-неорганических наноструктур на основе квантовых точек CdS и стирилхинолинового лиганда"
20. Шушин Анатолий Иванович "Особенности генерации электронной спиновой поляризации радикалов в процессах тушения триплетных состояний молекул"
21. Шушин Анатолий Иванович "Аномальная миграция поляронов в неупорядоченных органических полупроводниках и ее проявление в магнитных эффектах"
22. Зюзин Игорь Николаевич "Исследование алкокси-NNO-азоксисоединений методом ЯМР ^{15}N на природном содержании изотопа"
23. Козлова Светлана Геннадьевна "Фазовые переходы жидкость-жидкость и изотопический эффект в водных растворах лутидина по данным спектроскопии ЯМР высокого разрешения"
24. Юданова Евгения Ивановна "ЭПР исследование взаимного влияния спиновых носителей зарядов в полимерных композитах на основе полианилина, предельно допированного п-толуолсульфокислотой, и поли-(3-додецилтиофена)."
25. Бабкин Вячеслав Степанович "О природе расширения богатого предела"
26. Грасс Владислав Эвальдович "Получение керамоматричного композита $\text{Ti}_3\text{SiC}_2/\text{SiC}$ методом СВС-компактирования непорошковых слоевых композиций"
27. Дубовицкий Владимир Абрамович "Вычисление концентрационных пределов детонации жидких гомогенных взрывчатых систем"
28. Жаворонков Алексей Игоревич "Интенсификация процесса фильтрационного горения"
29. Кислов Владимир Михайлович "Конверсия пиролизных смол в пористой насадке"

30. Колесникова Юлия Юрьевна "Преобразование смол пиролиза древесины в горючий газ"
31. Кочетков Роман Александрович "Влияние спутного потока газа на закономерности горения порошковых и гранулированных смесей Ni + Al"
32. Кочетков Роман Александрович "Исследование влияние механической активации на горение прессованных образцов и образцов насыпной плотности из смеси Ni-Al"
33. Михалкин Виктор Николаевич "Предельные условия распространения газовой детонации по каналам постоянного сечения, в свободном пространстве и переходе детонации из трубы в объём"
34. Подлесный Дмитрий Николаевич "Предел устойчивости фронта горения углерода в наклонном вращающемся реакторе"
35. Сухов Алексей Валентинович "Эффекты взаимовлияния элементов при горении конструкций из полимерных материалов"
36. Тереза Анатолий Михайлович "Кинетика образования зародышей частиц сажи при использовании различных промоторов и ингибиторов процесса сажеобразования"
37. Уваров Валерий Иванович "Формирование металлических наноструктур при жидкофазном горении системы на основе алюминия и оксидов никеля и кобальта."
38. Цветков Максим Вадимович "Устойчивость CaCl_2 в условиях фильтрационного горения"
39. Шаповалова Оксана Вячеславовна "Совместное окисление метана и этилена в объемных проницаемых матрицах"
40. Эпинатьев Игорь Даниилович "Увеличение чувствительности и избирательности модифицированного спектрометра подвижности ионов для обнаружения и распознавания взрывчатых веществ"

Вечерняя сессия

16.00 Закрытие Симпозиума

30 СЕНТЯБРЯ, ВТОРНИК

Выходной

1 ОКТЯБРЯ, СРЕДА

Отъезд участников

Лекции

Тепловизионный метод в изучении динамики процессов адсорбционного взаимодействия молекул газа с твердыми телами

Вайнер Б.Г.

ИФП СО РАН, НГУ, г. Новосибирск

В обзорном докладе продемонстрирована высокая чувствительность современного тепловизионного метода для количественного изучения динамики адсорбционно-десорбционных процессов, продемонстрированы оригинальные измерительные устройства, реализующие данный подход, и приведены результаты для разнообразных систем газ–твердое тело.

Обнаружение и исследование спин-поляризованных атомов водорода, образующихся в фотохимических реакциях

Васютинский О.С.

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт Петербург

Разработан и апробирован для фотолиза молекул HBr новый экспериментальный метод, предназначенный для обнаружения и исследования спин-поляризованных атомов водорода. Показано, что разработанный метод может быть использован для исследования динамики реакций фотолиза важных для практики многоатомных молекул.

GRID технологии и вычислительная химия

Волохов В.М., Варламов Д.А., Волохов А.В.

ИПХФ РАН, Черноголовка

В докладе кратко рассмотрена история создания GRID технологий, их применение для решения квантово-химических прикладных задач, а также работы, выполненные в этой области лабораторией вычислительной химии ИПХФ РАН. Основное внимание уделено вкладу автором.

Термическая стабильность структуры и формы нанопроволок

Гордон Е.Б.

ИПХФ РАН, Черноголовка.

Необычность физико-химических свойств квазиодномерных объектов – металлических нанопроволок, в первую очередь, связана не с

использованием понятий механики сплошных сред для описания ансамблей, содержащих малое число атомов. Они являются свидетельством проявления в наномире принципиально новых свойств.

Влияние давления и температуры на изменение плотности и пермиттивности молекулярных жидкостей

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

Плотность и пермиттивность большого числа неполярных и полярных соединений при разных температурах (143 точек) и давлениях (более 500 точек) были собраны и проанализированы. Подобный анализ зависимости плотности от температуры и давления был проведен для 272 молекулярных жидкостей.

Необычные свойства возбужденных состояний ПЗЛМ

Лукова Г.В.
ИПХФ РАН, г. Черноголовка

Будет сделан обзор современных экспериментальных и теоретических сведений по фотонике d^0 металлоценов IV группы (предшественников катализаторов многих органических синтезов), в том числе в свете использования этих свойств в металлокомплексном катализе и фотосенорике.

Визуализация и интерпретация низкотемпературного самовоспламенения водородсодержащих смесей при высоком давлении

*Медведев С.П.¹, Хомик С.В.¹, Агафонов Г.Л.¹, Киверин А.Д.^{1,2},
Максимова О.Г.¹*

¹ ИХФ РАН, Москва

² ОИВТ РАН, Москва

Представлены результаты экспериментального и теоретического исследования низкотемпературного самовоспламенения водородсодержащих смесей при высоком давлении. С помощью высокоскоростной визуализации продемонстрирован эффект «раннего» самовоспламенения. Дана интерпретация выявленных особенностей с помощью детального реакционного механизма окисления водорода с введенными квантовыми поправками к константам скоростей экзотермических реакций.

Каноническая форма метода Хартри-Фока для систем с открытыми электронными оболочками

Плахутин Б.Н.
ИК СО РАН, Новосибирск

Обсуждаются недостатки существующих методов Хартри-Фока для открытых электронных оболочек (ROHF, UHF, и их различные модификации) и различные подходы к их устранению. Дана новая (каноническая) формулировка метода ХФ для открытых оболочек, удовлетворяющая всем необходимым квантово-механическим условиям.

Локально неравновесные молекулярные процессы переноса в разных агрегатных состояниях

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

Сформулированы условия замыкания новой системы уравнений переноса массы, импульса и энергии в локально неравновесных процессах, протекающих в неоднородных системах с произвольной плотностью, которые являются универсальными для трех агрегатных состояний и границ раздела их фаз. Потоки описываются на атомно-молекулярном уровне с помощью неравновесных дискретных унарных и бинарных функций распределений с учетом межчастичных потенциальных взаимодействий компонентов системы.

Сенсорные свойства наноструктурированных пленок на основе смешанных полупроводниковых металлоксидов

Бельшева Т.В., Боднева В.Л., Герасимов Г.Н., Громов В.Ф., Кожушнер М.А., Трахтенберг Л.И.
ИХФ РАН, Москва

Изучены отклики на H_2 и CO в пленках наноструктурированных смешанных полупроводниковых оксидов. Исследовались пленки $In_2O_3 \cdot SnO_2$, $In_2O_3 \cdot ZnO$ и $In_2O_3 \cdot CeO_2$ различного состава при детектировании 2% H_2 и 0.46% CO в воздухе в интервале от 330 до 530 °С. Развита теория отклика в полупроводниковых оксидах.

Катализ перспективный в производстве биотоплив

Цодиков М.В.¹, Чистяков А.В.¹, Гехман А.Е.²

ИНХС РАН, Москва

ИОНХ РАН, Москва

В работе представлены результаты по изучению прямого каталитического превращения основных первичных продуктов биомассы в углеводородные компоненты топлив.

Квазидвумерные материалы на основе дихалькогенидов: структуры, физико-химические свойства и приложения

Чернозатонский Л.А.

ИБХФ РАН, Москва

В докладе дается обзор работ по слоистым структурам из дихалькогенидов с переходными металлами (на примерах MoS, MoSe₂, WS₂, WSe₂), а также их сочетаний с графеновыми слоями. Рассматриваются как их физико-химические свойства, так и новые устройства на их основе, использующие широкую запрещенную зону в электронных спектрах таких структур.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

Ферромагнитные нанокompозиты

Аронзон Б.А.^{1,2}

1. НИЦ «Курчатовский институт, Москва,
2. ФИАН, Москва

Исследованы различные полупроводниковые структуры: кристаллы GaSb с наногранулами MnSb, InSb; системы на основе силицидов Mn; ZnO с нанокластерами Co и нанокompозиты Ni/ППК. Во всех случаях наблюдали проявления ферромагнетизма при комнатной температуре. Показана возможность использования этих материалов в качестве датчиков магнитного поля. В нанокompозитах Fe/SiO₂ удалось наблюдать спектр квантовых явлений: квантование кондуктанса, кулоновскую блокаду и перколяционный переход металл-диэлектрик по температуре.

Низкотемпературные химические транспортные реакции

*Григорян Г.Л.*¹, *Бегларян А.А.*¹, *Арутюнян А.Б.*²

1. Ереванский государственный университет, Ереван
2. Институт химической физики им.А.Б. Налбандяна НАН РА, Ереван

Низкотемпературные газофазные реакции различных твердых оксидов и солей с парами пероксида водорода, приводящие к переносу вещества, составляют новый класс химических транспортных реакций (ХТР), которые по многим характеристикам проявляют определенные преимущества перед высокотемпературным ХТР.

Оценка величины сродства к электрону из данных о средних временах жизни отрицательных ионов

*Асфандиаров Н.Л.*¹, *Пшеничнюк С.А.*¹, *Воробьев А.С.*¹, *Нафикова Е.П.*¹,
*Елькин Ю.Н.*², *Моделли А.*³

1. ИФМК УНЦ РАН, Уфа
2. ТИБОХ ДВО РАН, Владивосток
3. Химический факультет Болонского университета, Болонья, Италия

Методом масс-спектрометрии отрицательных ионов измерены средние времена жизни отрицательных молекулярных ионов двенадцати производных нафтохинона. В простом аррениусовском приближении

проведена оценка величины сродства к электрону исследованных молекул. Результаты сопоставлены с расчетами по методу DFT B3LYP/6-31+G(d).

**Полимеризация этилена на титанмагниевого катализаторах:
исследование кинетики по данным о числе и реакционной способности
активных центров**

Барбанов А.А.¹, Сукулова В.В.¹, Мацько М.А.¹, Захаров В.А.^{1,2}

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

Получены данные о числе активных центров (C_p) и константе скорости роста (k_p) при полимеризации этилена на трех модификациях высокоактивных титанмагниевого катализаторов методом ингибирования полимеризации радиоактивным монооксидом углерода. Исследовано влияние температуры полимеризации и водорода на величины C_p и k_p .

**Светоиндуцированные магнитные аномалии в молекулярных
магнетиках на основе меди и нитроксильных радикалов**

Барская И.Ю.^{1,2}, Вебер С.Л.¹, Третьяков Е.В.¹, Толстиков С.Е.¹, Овчаренко В.И.¹, Багрянская Е.Г.^{1,3}, Федин М.В.¹

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

Данная работа посвящена исследованию молекулярных магнетиков вида $Cu(hfac)_2L^R$, которые претерпевают термо- и светоиндуцированные структурные перестройки. Исследовано влияние химической модификации, окружения, магнитных свойств на способность к светопереключению спинового состояния.

**Развитие приложений ЯМР и МРТ на основе индуцированной
параводородом поляризации ядер**

Барский Д.А.^{1,2}, Коптюг И.В.¹, Ковтунов К.В.¹

1. Международный Томографический Центр СО РАН, Новосибирск
2. Новосибирский Государственный Университет, Новосибирск

В работе продемонстрированы новые способы гиперполяризации молекул, как в жидкой, так и в газовой фазе. Было показано значительное усиление сигнала ЯМР при обратимом взаимодействии водорода с субстратом в

сильных магнитных полях. Продемонстрирована ^1H 3D томография газов с помощью гиперполяризации пропана с субмиллиметровым разрешением.

Характеризация электроноакцепторных центров поверхности в ходе каталитических и топохимических реакций

Бедило А.Ф.^{1,2}, Шуваракова Е.И.^{1,2}

1. ИК СО РАН, Новосибирск
2. НТИ МГУДТ, Новосибирск

Разработаны методики исследования электроноакцепторных центров поверхности в ходе топохимических и каталитических реакций. Показано существование корреляций между концентрацией электроноакцепторных центров и активностью нанокристаллических оксидов в каталитическом дегидрохлорировании 1-хлорбутана и деструктивной сорбции CF_2Cl_2 .

Электронная структура и проводимость в Pt-замещенных клатратных силицидах

Борщ Н.А.¹, Переславцева Н.С.¹, Курганский С.И.²

1. ФГБОУ ВГТУ, Воронеж
2. ФГБОУ ВГУ, Воронеж

Представлены результаты расчета электронного строения Pt-замещенных клатратных силицидов. Расчет проводился методом линеаризованных присоединенных плоских волн. Анализируется влияние числа замещений и их кристаллографической позиции на электронно-энергетический спектр и металлические свойства Pt-замещенных клатратов.

Компьютерное моделирование элементов для конструирования одномерных наноструктур на основе кремния

Борщ Н.А.¹, Переславцева Н.С.¹, Курганский С.И.²

1. ФГБОУ ВГТУ, Воронеж
2. ФГБОУ ВГУ, Воронеж

Представлены результаты оптимизации пространственной структуры и рассчитанные электронные спектры анионных кластеров ScSi_n^- ($n = 6 - 20$). Расчеты проводились в рамках теории функционала плотности. Путем сопоставления рассчитанных и известных экспериментальных данных установлены реальные пространственные структуры кластеров.

Нанокластеры полупроводниковых квантовых точек – новый объект нанофотоники

Бричкин С.Б.
ИПХФ РАН, Черноголовка

Объекты с новым уровнем структурной организации - нанокластеры (НК) коллоидных квантовых точек могут быть получены непосредственно в растворах. Управляя эффективностью безызлучательного резонансного переноса энергии в НК, можно создавать перспективные для нанотехнологии частицы с заданными спектральными характеристиками.

Молекулярные органо-полиоксометаллатные диоды

Буданов Б.А., Ковалевский С.А., Балашов Е.М., Далидчик Ф.И.
ИХФ РАН, Москва

Методами СТМ-СТС изучена туннельная проводимость наноконтактов, содержащих органо-полиоксометаллатные комплексы. Обнаружен и интерпретирован диодный эффект с коэффициентами выпрямления до 30-50. Установлен новый, «бирезонансный» механизм формирования высокой проводимости туннельных наноконтактов, который включается при псевдопересечении электронных термов комплекса.

Процессы переноса энергии в бихромоформных стирилхинолиновых диадах

Будыка М.Ф.
ИПХФ РАН, Черноголовка

Рассмотрены процессы переноса энергии и принципы управления этими процессами в бихромоформных стирилхинолиновых диадах общей формулы SQ-M-X, где SQ – фрагмент 2-стирилхинолина, М – мостиковая группа, чаще всего, полиметиленовая, X – вторая функциональная группа, способная быть донором (когда X – фрагмент нафтаола) или акцептором (когда X – фрагмент мероцианина) энергии для SQ.

Получение и изучение кристаллической структуры наноструктурированных порошков системы никель-кадмий

Захаров Ю.А.^{1,2}, Вальнюкова А.С.^{1,2}, Пугачев В.М.¹

1. КемГУ, Кемерово

2. ИУХМ СО РАН, Кемерово

Впервые получен химическим методом чистый (без промежуточных продуктов) наноструктурированный порошок системы Ni-Cd. Установлены области образования неравновесного твердого раствора и формирование интерметаллида, что в целом является спецификой наноструктурированного состояния системы.

Холловские сенсоры на основе гибридного углеродного материала

*Волков В.Т.¹, Матвеев В.Н.¹, Левашов В.И.¹, Кононенко О.В.¹, Матвеев Д.В.²,
Касумов Ю.А.¹, Ходос И.И.¹*

1. ИПТМ РАН, г. Черноголовка
2. ИФТТ РАН, г. Черноголовка

В работе представлен гибридный углеродный материал, из которого изготавливались сенсоры Холла. Максимальная чувствительность 3000 Ом/Т была получена на пленках, синтезированных с Ni катализатором. Для сенсора Холла с размерами рабочей площадки $0.13 \times 0.13 \text{ мкм}^2$ чувствительность по магнитному полю составляла 1140 Ом/Т.

Связь размера, формы и массовой доли частиц серебра с активационными параметрами катализа термодеструкции поликарбонатных металлокомпозитов.

Волкова Н.Н., Богданова Л.М., Кузуб Л.И., Дремова Н.Н.
ИПХФ РАН, г. Черноголовка

Определены константы скорости и энергии активации термодеструкции поликарбонатных пленок, содержащих частицы серебра разной формы и размера. Наибольшей каталитической активностью обладают сферические частицы серебра размером менее 40 нм.

Фосфорсодержащие лиганды на основе органокализаторов как высокоэффективные хиральные индукторы для металлокомплексного катализа

Гаврилов К.Н., Грошкин Н.Н., Луговский В.В., Чучелкин И.В.
РГУ имени С.А. Есенина, г. Рязань

На базе диамидов щавелевой кислоты и 1,2-аминоспиртов получено несколько неизвестных ранее групп хиральных лигандов фосфитной

природы, в том числе располагающих P^* - стереоцентрами. Они нашли успешное применение в ряде Pd-катализируемых реакций аллильного замещения и десимметризации, в т.ч. практически значимых.

Адсорбционное взаимодействие H_2 с алюмофосфатными цеолитами AIPO

Гаврилов В.Ю., Гренев И.В.
ИК СО РАН, Новосибирск

Исследовано адсорбционное взаимодействие H_2 с атомами образующими решетку цеолитов AIPO. Проведен расчет потенциала межмолекулярного взаимодействия суммированием индивидуальных парных взаимодействий $H_2 - O$ (Al, P). Построены изопотенциальные поверхности, позволившие установить форму микроканалов цеолитов и места преимущественной локализации молекулы сорбата в микропористом пространстве.

Взаимодействие водорода и кислорода на поверхности единичных наноструктур золота.

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

В докладе представлены результаты, демонстрирующие особенности взаимодействия водорода с кислородом на поверхности единичных наноструктур золота, нанесенных на поверхность высокоупорядоченного пиролитического графита.

Физико-химические и детонационные свойства и взрывное действие нескольких новых мощных взрывчатых нитратов

Голубев В.К., Клапётке Т.М.
Университет Людвиг-Максимилиана (ЛМУ), Мюнхен

Приводятся результаты по определению физико-химических и детонационных свойств и взрывного действия шести мощных взрывчатых нитратов. Изучались аминотетразолий нитрат, диаминотетразолий нитрат, диаминоуроний нитрат, 1-амино-3-нитрогуанидиний нитрат, оксалилгидразиний нитрат и оксалилгидразиний динитрат.

Механизмы и энергетика разложения N-бис-полифункционально замещенных N-нитраминов

Голубев В.К.

Университет Людвига-Максимилиана (ЛМУ), Мюнхен

Приводятся результаты расчетного определения механизмов и энергии разложения ряда N-бис-полифункционально замещенных N-нитраминов, имеющих общую формулу R-N(NO₂)-R. Полученные расчетные значения энергии разложения хорошо согласуются с экспериментальными значениями энергии активации термического разложения нитраминов.

Квантово-химический расчет спектральных параметров комплексов меди как метод определения их состава и строения

Голубева Е.Н.¹, Громов О.И.¹, Жидомиров Г.М.^{1,2}

1. МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

2. ИК СО РАН, Новосибирск

Реализованы подходы для установления состава Cu(II) органических интермедиатов путем расчетов на основе теории функционала плотности. Показано, что согласие экспериментальных спектральных характеристик с соответствующими расчетными значениями достигается лишь в случае двух комплексов состава CuCl₂R' и CuCl₃R'.

Влияние геометрических параметров исходных образцов на процесс «жидкофазного» горения смесей термитного типа в условиях давления газовой среды.

Горшков В.А., Милосердов П.А.

ИСМАН, г. Черноголовка

В работе исследовано влияние геометрических параметров исходных образцов на закономерности автоволнового синтеза на примере горения систем термитного типа (MoO₃, WO₃, Nb₂O₅, TiO₂) x Al x Si под давлением газа. Показано сильное влияние масштабного фактора (M_{см.}, V_{см.}) на формирование и распространение фронта горения, скорость горения, а также процессы диспергирования и фазоразделения.

Полимерные носители клеточных культур

*Григорьев Т.Е., Романова И.А., Варганов Р.Д., Тенчурин Т.Х., Родина А.В.,
Москалева Е.Ю., Чвалун С.Н.*

НИЦ «Курчатовский институт», Москва

На основе природных и синтетических полимерных материалов были получены материалы с различной морфологией – нетканые, губчатые и пленочные. Проведен анализ адгезии и пролиферации клеточных культур мезенхимальных стволовых клеток.

Диамagnetизм, индуцированный адсорбцией никеля на углероде

Данишевский А.М., Рогачев А.Ю.

ФТИ им.А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

Изучены магнитные характеристики кластеров Ni, адсорбированных в порах нанопористого углерода (НПУ). Образцы НПУ, химически приготовленные из разных карбидов, являются диамагнетиками. Введение достаточного (в зависимости от размеров микропор) количества Ni приводит к увеличению диамагнитной восприимчивости углерода.

Фотодиссоциация индол-карбоксальдегидов под действием УФ-излучения: экспериментальное и теоретическое исследование

Дьяков Ю.А., Ho Y.C., Ni C.K.

Inst. of Atomic and Molecular Sciences, Acad. Sinica, Taipei, Taiwan

Исследованы процессы фотодиссоциации различных изомеров индол-карбоксальдегидов в зависимости от положения замещающей функциональной СОН-группы. Обнаружено принципиальное различие в фотохимических свойствах этих соединений в зависимости от наличия в них внутримолекулярной водородной связи.

Превращение моноклинного диоксида циркония в метастабильную тетрагональную модификацию при ударно-волновом воздействии

Жуков А.Н., Якушев В.В., Рогачева А.И.

ИПХФ РАН, Черноголовка

В работе изучено влияние ударно-волнового воздействия на моноклинную фазу диоксида циркония. Показано, что при высокотемпературном ударно-

волновом воздействии на диоксид циркония происходит частичное превращение исходной моноклинной модификации диоксида циркония в тетрагональную высокотемпературную флюоритную модификацию.

Волновая функция антиферромагнитного состояния

Загуляев С.Н.

НИИ Физики им.В.А. Фока, СПбГУ, Санкт-Петербург.

Предложен новый гамильтониан $\hat{H}(x_1, \dots, x_N)$, являющийся абелевым сужением на подпространство функций $\Psi_{11SM(1\frac{N}{4}, 1\frac{N}{4})}(x_1, \dots, x_N)$ точного многоэлектронного гамильтониана с релятивистскими поправками на спиновое диполь-дипольное взаимодействие. Его спектр и собственные функции позволяют аналитически описывать основные характеристические свойства антиферромагнетиков.

Влияние состояния и распределения ионов меди в Cu/ZSM-5 на каталитические свойства в реакции селективного восстановления NO пропаном

Зенковец Г.А., Шутилов Р.А., Гаврилов В.Ю.

ИК СО РАН, Новосибирск

Рассмотрены методы регулирования состояния и локализации ионов меди в катализаторах Cu/ZSM-5, получаемых методами ионного обмена и пропитки с использованием прекурсоров, содержащих комплексные орбитально упорядоченные ионы меди. Сопоставлены их физико-химические и каталитические свойства в реакции СКВ NO пропаном.

Экспериментальное исследование распространения ударной волны в гелии, разбавленном Хе

Зиборов В.С.¹, Галиуллин Р.А.², Ефремов В.П.¹, Фортон В.Е.¹, Шумова В.В.¹

¹ОИВТ РАН, Москва

²ООО «РезонансЪ», Москва

Методами многоканальной эмиссионной спектроскопии и лазерным шпирен методом выполнено ударно-грубое исследование распространения УВ в лёгком газе, содержащем малую примесь тяжёлого. Обнаружено излучение Хе при числах Маха $M < 2.8.$, получена зависимость профиля плотности фронта УВ от концентрации тяжелого газа.

Частицы дисперсной фазы в растворах хиральных гелаторов

Зленко Д.В.¹, Стовбун С.В.²

1. Кафедра биофизики биологического ф-та МГУ, Москва.
2. Институт Химической Физики РАН, Москва.

Методом молекулярной динамики смоделирован процесс образования нанокапель в разбавленных растворах низкомолекулярных хиральных гелаторов. Установлена фрактальная природа капель, топология которых совпадает с топологией экспериментальных агрегатов. При образовании капель молекулы ориентируются за счёт диполь-дипольных взаимодействий.

Влияние магнитного поля на квантовые выходы флуоресценции эксиплексов и флуорофоров

Иванов А.И., Феськов С.В.
ВолГУ, Волгоград

Представлена теория магнитного эффекта на квантовый выход флуоресценции флуорофора и эксиплекса для двух веллеровских схем. Выявлены области параметров, в которых магнитный эффект наблюдаем. Отмечена близость как значений эффектов, так и их зависимостей от параметров для двух схем. Найден единственный параметр – константа скорости ассоциации радикальной пары в эксиплексе, зависимость эффекта от которой противоположенная в первой и второй схемах.

Синтез, свойства, а также способы оценки эффективности и безопасности инъекционных препаратов для лечения остеоартритов.

Иванов П.Л.
АНО МНИЦИТ «МАРТИНЕКС»

В работе анализируются способы изучения эффективности и безопасности инъекционных препаратов для лечения и профилактики остеоартритов. Приведены результаты токсикологического исследования, и оценка токсичности продукта. Проведена оценка влияния препарата на восстановление сустава с помощью стабиллографической платформы.

Диссоциативная адсорбция водорода на кластере Pt₂₅ в вакууме и его реакции с адсорбированными неперделельными альдегидами

Охапкин А.И., Игнатов С.К., Гаждиев О.Б.

ННГУ, г. Нижний Новгород

В работе изучена диссоциативная адсорбция молекулярного водорода на квинтетных и триплетных кластерах платины Pt₂₅ методом функционала плотности. Исследованы различные положения хемосорбированных атомов H на поверхности кластера относительно друг друга и определены их энергетически наиболее выгодные ориентации.

Исследование конверсии адсорбированного на Fe-Zr/ γ -Al₂O₃ этанола сочетанием методов ТГ/ДСК и ГХ/МС

Алиева Н.М., Акберли Г.Н., Исмаилов Э.Г., Юсифов Ю.Г.
Институт нефтехимических процессов НАН Азербайджана, Баку

Метод ТГ/ДСК в сочетании с ГХ/МС использован для изучения механизма конверсии этанола в углеводороды на Fe-Zr/ γ -Al₂O₃. Определен состав газофазных продуктов в зависимости от содержания активных компонент в режимах изотермического нагрева при 473 и 673К в среде этанола и термодесорбции адсорбированного этанола от комнатной до 973К.

Механохимический синтез высокодисперсного наноструктурированного гамма-моноалюмината лития для электрохимической энергетики

Исупов В.П., Татарина Я.Е., Еремина Н.В.
ИХТТМ СО РАН, Новосибирск

Изучен механизм формирования нанодисперсного γ -LiAlO₂, образующегося при термической обработке механохимически активированной смеси Li₂CO₃ и Al(OH)₃. Полученные данные позволяют предполагать, что дисперсность γ -LiAlO₂ определяется дисперсностью гидроксида алюминия после механической активации смеси.

Исследование взаимодействия NO₂ с модельными образцами Au/C методом РФЭС.

Калинкин А.В., Смирнов М.Ю., Бухтияров В.И.
ИК СО РАН, г. Новосибирск.

В работе методом РФЭС исследовано взаимодействие диоксида азота с модельными образцами, полученными вакуумным напылением золота на исходный и активированный ионами аргона графит. Обнаружено, что в последнем случае происходит окисление золота с образованием Au(III).

Образование кавитационной шейки при вытяжке полимеров

Кечекьян А.С.
ИСПМ РАН, Москва

Исследуется не описанный ранее тип шейки, развивающейся в ряде полимеров при очень больших скоростях вытяжки. Проводится сравнение с известными механизмами распространения шейки. Обсуждается роль «кавитационной шейки» в автоколебательном распространении шейки.

Экспериментальное изучение неустойчивости фронта сверхадиабатического горения

Кислов В.М., Салганский Е.А., Зайченко А.Ю., Глазов С.В.
ФГБУН ИПХФ РАН, Черноголовка

Экспериментально исследовано влияние размера частиц и диаметра реактора, а также расхода окислителя на устойчивость фронта сверхадиабатического горения. Показано, что увеличение расхода окислителя ведет к потере устойчивости фронта, а увеличение диаметра частиц повышает устойчивость.

Особенности формирования кристаллической структуры алюминида никеля в условиях СВС

Ковалев И.Д., Пономарев В.И., Ковалев Д.Ю., Коновалихин С.В., Кочетов Н.А.
ИСМАН, Черноголовка

Полученные методом вращающейся рентгенографии в системе Ni-Al дифракционные картины отражают динамику процесса упорядочения твердого раствора от высокотемпературной разупорядоченной фазы [Ni,Al] с пространственной группой $Im\bar{3}m$ к низкотемпературной упорядоченной фазе NiAl (пространственная группа $Rm\bar{3}m$).

Измерение зарядового состояния аморфных металлических наноструктур на проводящем носителе.

*Кожевин В.М.¹, Явсин Д.А.¹, Анкудинов А.В.¹, Ростовщикова Т.Н.²,
Гуревич С.А.¹*

1. ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург
2. МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

В докладе приводится анализ чувствительности зарядового состояния аморфных металлических наноструктур к выбору типа материала наночастиц и их поверхностной плотности. Результаты теоретического анализа, проведённого с использованием данных Кельвин-зонд измерений, указывают на наличие устойчивой корреляции электрических и каталитических свойств исследованных структур.

Исследование влияния влажности на закономерности горения и фазовый состав порошковых и гранулированных смесей Ti+0.5C

Кочетков Р.А., Сеплярский Б.С., Тарасов А.Г.
ИСМАН, Черноголовка

В данной работе проводилось исследование закономерностей горения как порошковых, так и гранулированных смесей Ti+0,5C при различном содержании влаги в исходной смеси как при продуве образца аргоном (спутная фильтрация), так и без продува.

Исследование процессов формирования активных центров нанесенных титанмагниевого катализаторов полимеризации олефинов

Кошевой Е.И., Микенас Т.Б., Захаров В.А.
ИК СО РАН, Новосибирск.

Установлено, что сверхактивные титанмагниевого катализаторы (≤ 0.1 % масс. Ti) после активации AlR_3 содержат в своем составе изолированные ионы Ti^{3+} . Найдена корреляция между активностью в полимеризации этилена и долей этих ионов. Исследованы продукты взаимодействия катализаторов с AlR_3 и предложены схемы образования соединений Ti^{3+} .

Моделирование эндоэдральных комплексов актиний-фуллерен при помощи релятивистской теории функционала плотности

Круглов С.А.¹, Зайцевский А.В.^{1,2}, Поляев А.В.¹, Демидов Ю.А.²

1. НИЦ «Курчатовский институт», Москва

2. Петербургский институт ядерной физики, Гатчина

В рамках данной работы для комплекса $Ac@C_N$ рассчитаны основные физико-химические параметры комплексов $Ac@C_N$ и выполнено их сопоставление с параметрами соответствующих комплексов лантана.

Полученные результаты могут быть использованы для выбора направления синтеза радиофармпрепаратов.

Электрохимическое и эпр исследование механизма окисления феназин-ди-N-оксида в присутствии изопропанола на электродах из стеклоуглерода и одностенных углеродных нанотрубок.

Кулаковская С.И.¹, Куликов А.В.¹, Свиридова Л.Н.², Стенина Е.В.²

¹ИПХФ РАН, г.Черноголовка

²МГУ имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, г. Москва,

Методом циклической вольтамперометрии на электродах из стеклоуглерода (СУ) и одностенных углеродных нанотрубок (ОСУНТ) в растворах 0.1 М LiClO₄ в ацетонитриле изучен механизм окисления феназин-ди-N-оксида, как в отсутствие, так и в присутствии изопропанола.

Самоорганизация амфифильных блок-сополимеров на основе кристаллизующегося поли-L-лактида и полиэтиленоксида

Кулебякина А.И.¹, Козлова Е.В.^{1,2}, Стрельцов Д.Р.², Чвалун С.Н.¹

1. НИЦ «Курчатовский институт», Москва

2. ИСПМ РАН, Москва

В работе исследована самоорганизация в воде и в тонких поверхностных слоях ди- и триблок-сополимеров на основе кристаллизующегося поли-L-лактида и полиэтиленоксида с различным соотношением длин блоков. Показано, что параметры образующихся структур определяются как строением сополимеров, так и условиями среды.

Эффективное повышение взаимной комплементарности полимерных волокон и термореактивных связующих как результат их одновременной модификации заряженными высокодисперсными частицами алмазной шихты

Куркин Т.С.¹, Тикунова Е.П.¹, Кечекьян А.С.¹, Долматов В.Ю.², Озерин А.Н.¹

1. ИСПМ, Москва

2. ЗАО «Алмазный центр», Санкт-Петербург

В работе рассматриваются результаты, полученные в ходе продолжения цикла работ по исследованию микроструктурных механизмов адгезионной прочности и устойчивости к разрушению межфазного интерфейса в системах

«полимерное волокно – термореактивное связующее», наполненных высокодисперсными наноразмерными частицами алмазной шихты (АШ).

Определение констант связывания гуминовых кислот с ионами металлов методом абсорбции

Лаврик Н.Л., Муллоев Н.У.
ИХКГ СОРАН, Новосибирск

Определены величины весовых коэффициентов поглощения комплексов $\{\text{ГК}-\text{Cu}^{2+}\}$ ϵ_c на $\lambda = 250 \text{ nm}$: для $[\text{ГК}] = 5 \text{ мг/л}$ составили $155 \text{ л}\cdot\text{г}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}$ и $200 \text{ л}\cdot\text{г}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}$ для $[\text{CuSO}_4\cdot 5\text{H}_2\text{O}] = 1.25\cdot 10^{-4} \text{ М}$ и $2.5\cdot 10^{-4} \text{ М}$ соответственно. Полученные величины весовых коэффициентов поглощения в 3-4 раза больше коэффициентов поглощения свободной формы ГК ϵ_0 ($46 \text{ л}\cdot\text{г}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}$)

Пьезопроводимость хиральных углеродных нанотрубок

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

¹⁾ВолГУ, г. Волгоград

²⁾ВолГАУ, г. Волгоград

Представлены результаты теоретического исследования влияния разных видов механических деформаций (растяжение, сжатие) на пьезорезистивные характеристики хиральных углеродных нанотрубок (УНТ). Рассчитана основная характеристика пьезорезистивного эффекта – компоненты тензора эластопроводимости, исследована ее зависимость от геометрических характеристик УНТ. Изучена зависимость проводимости хиральных наноматериалов от концентрации донорных и акцепторных примесей.

Надмолекулярная фотохимия тетрапирролов

Лобанов А.В.
ИХФ РАН, Москва

Рассмотрена надмолекулярная фотохимия d^0 - и d^{10} -металлокомплексов тетрапирролов в зависимости от способа их агрегации (Н- или J-типа) и координационного взаимодействия в супрамолекулярных системах. Обсуждаются традиционные и новые приложения фотоактивности и люминесцентных свойств тетрапирролов и их надмолекулярных структур.

Краунсодержащие стироловые красители с аммонийными заместителями: димеризация и стереоспецифическое [2+2]-фотоциклоприсоединение

Лобова Н.А.¹, Ведерников А.И.¹, Дмитриева С.Н.¹, Ушаков Е.Н.², Кузьмина Л.Г.³, Громов С.П.¹

1 ЦФ РАН, Москва

2 ИПХФ РАН, Черноголовка

3 ИОНХ РАН, Москва

Разработан синтез краунсодержащих стироловых красителей, имеющих терминальные группы NH_3^+ в *N*-заместителе, оценены константы устойчивости димерных комплексов ($\lg K_d$ до 8.2) красителей, изучена стереоспецифическая реакция [2+2]-фотоциклоприсоединения ($\phi_{\text{ФЦП}}$ до 0.38) комплексов с образованием производных *rctt*-циклобутанов.

Тонкие взаимодействия регулируют триплетный перенос энергии

Лукова Г.В.¹, Милов А.А.²

1. ИПХФ РАН г. Черноголовка

2. ЮНЦ РАН, г. Ростов-на-Дону

С целью оптимизации архитектуры молекул, их кластеров и оценки влияния наноразмерных эффектов на фото- и химические процессы осуществлена экспериментально-теоретическая оценка влияния слабых координационных взаимодействий на триплетный перенос энергии в конденсированной фазе.

Перспективы импульсной фликкер-шумовой спектроскопии

Маковийчук М.И.

ЯФ ФТИ РАН, Ярославль

Метод импульсной фликкер-шумовой спектроскопии предлагается для оценки совершенства формируемых наноструктур и проведения работ по мониторингу газового и электромагнитного загрязнения окружающей среды.

Передача нестационарной ударно-волновой нагрузки через насыпной материал

Максимова О.Г., Медведев С.П., Хомик С.В., Сильников М.В.

ИХФ РАН, Москва

На основе экспериментов по воздействию взрывной волны на коническую полость, заполненную песком, предложен новый алгоритм экспериментально-расчетного исследования, представляющий основу методики оценки воздействия ударных (взрывных) волн на объекты сложной формы с покрытиями из различных материалов.

***E''* центры в α -кварце**

Машиковцев Р.И.¹, Пан Ю.²

¹ИГМ СО РАН, Новосибирск

²Саскачеванский университет, Канада

В кристаллах кварца наблюдается большое количество триплетных дефектов (*E''* центры), которые образуются при варьировании облучения образца быстрыми электронами с последующей тепловой обработкой. Природа триплетных центров объясняется образованием бирадикалов при обменном взаимодействии двух неспаренных спинов, захваченных на оборванные связи атомов Si вблизи вакансии атома кислорода.

Исследование процесса агломерации бора при горении в энергетических конденсированных системах

Мееров Д.Б., Моногаров К.А., Муравьев Н.В., Брагин А.А., Кушнарченко И.В.
ИХФ РАН, Москва

В работе исследован процесс агломерации и полнота сгорания металлического горючего в составах на основе В, ПХА и связки. Определены размеры отобранных агломератов, содержание в них активного бора и время пребывания в высокотемпературном потоке продуктов сгорания.

Биоразлагаемые смеси, полученные *in situ* сополимеризацией полилактида и полиамида-6

Мещанкина М.Ю., Кузнецова Я.А., Щербина М.А., Чвалун С.Н.
ИСПМ РАН, г. Москва

Методами непрерывной экстракции в кипящем растворителе, инфракрасной спектроскопии, оптической микроскопии и динамического механического анализа исследованы смеси, полученные *in situ* компатибилизацией полиамида-6 и полилактида. Обнаружено образование значительной доли сополимера ПА-6 и ПЛА.

Исследование процесса горения и закономерностей автоволнового синтеза литой оксидной керамики $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-Cr}_2\text{O}_3$ x ZrO_2

Милосердов П.А., Горшков В.А., Юхвид В.И.
ФГБУН ИСМАН, Черноголовка.

В работе исследованы закономерности самораспространяющегося высокотемпературного синтеза литых оксидных композиционных материалов ($\text{Al}_2\text{O}_3\text{-Cr}_2\text{O}_3$ x ZrO_2) на примере горения систем термитного типа: $\text{CrO}_3 / \text{Cr}_2\text{O}_3 / \text{Al} + \alpha (\text{ZrO}_2)$ под давлением инертного газа. Подобраны оптимальные условия по управлению процессом горения и синтезом целевого оксидного материала заданного состава и микроструктурой.

Особенности релаксационного поведения ориентированных полимеров, полученных методом деформирования в металлической матрице

Михайлик Е.С., Кечекьян А.С., Куркин Т.С., Озерин А.Н.
ИСПМ им. Ениколопова при РАН, Москва

Проведено исследование релаксационного поведения ориентированных полимеров, деформированных в металлической матрице, на примере полиэтилентерефталата. Выявлено, что при вытяжке около 90% наблюдается экстремум абсолютной усадки.

О механизме воспламенения и потухания очагов при горении гомогенных порохов

Крупкин В.Г., Мохин Г.Н.
ИХФ РАН, Москва

Предложен механизм воспламенения и потухания очагов в гомогенном конденсированном веществе при ведущей роли к-фазы. Образование очагов проявляется как пульсирующий режим горения с чередованием воспламенения, быстрого сгорания и потухания очагов на поверхности пороха. Этот механизм приводит к возникновению дискретных волн горения в гомогенных системах.

Газофазный окислительный крекинг легких алканов как основа альтернативного GTL-процесса

Магомедов Р.Н.¹, Никитин А.В.², Савченко В.И.¹, Арутюнов В.С.²

1. ИПХФ РАН, Черноголовка
2. ИХФ РАН, Москва

При газофазном окислительном крекинге легких алканов C₂-C₅ на соотношение этилена и СО в продуктах влияют как время пребывания в реакторе, так и температура процесса. Однако основным параметром, определяющим предельное соотношение этих продуктов, достигаемое в области глубоких конверсий реагентов, является исходное соотношение углеводород/кислород.

Распад тетраоксанов: квантово-химическое исследование механизма реакции

*Овчинников М.Ю., Сафаров Ф.Э., Хурсан С.Л., Шумаев В.Ю.
ИОХ УНЦ РАН, г. Уфа*

Настоящая работа посвящена исследованию механизма распада замещенных 1,2,4,5-тетраоксанов с использованием методов квантовой химии. Локализованы ключевые структуры распада пероксидов. Установлены стадии образования эмиттера свечения.

Закономерности образования частиц галогенидов серебра на основе комплексов полиэлектролит – ион серебра в водных растворах.

*Озерин А.С., Радченко Ф.С., Кротилова О.А., Колесниченко Е.В.
ВолгГТУ, Волгоград*

Изучены закономерности взаимодействия ионов серебра с полиэлектролитами в водных растворах. Определены предельные составы и константы устойчивости комплексов. На основе изученных комплексов синтезированы частицы галогенидов серебра.

Структура и электрофизические свойства тонкопленочных наноконкомпозитов на основе ароматических полимеров и полупроводниковых наночастиц халькогенидов, синтезированных из газовой фазы

*Озерин С.А.
ИСПМ РАН, Москва*

Методом полимеризации из газовой фазы синтезированы нанокomпозиты на основе поли-п-ксилилена и халькогенидов. Установлено, что элетропроводность этих пленок в окрестности порога перколяции определяется проводимостью границ полимерная матрица – наночастица сульфида. Методами диэлектрической спектроскопии показано, что температура подложки в ходе формирования пленок ППК определяет величину диэлектрической проницаемости, а также время диэлектрической релаксации полученных покрытий в широком диапазоне температур.

Разработка наноструктурированных каталитических покрытий на внутренней поверхности капиллярного микрореактора для селективного гидрирования ацетиленовых спиртов

Охлопкова Л.Б.¹, Керженцев М.А.¹, Матус Е.В.¹, Просвирин И.П.¹, Исмаилов З.Р.^{1,2}

1. ИК СО РАН, Новосибирск
2. ИУХМ СО РАН, Кемерово

Исследования в области микрореакторов являются быстро развивающейся областью во всем мире. Настоящая работа посвящена синтезу, исследованию и установлению закономерностей формирования PdZn/TiO₂ наноструктурированных каталитических покрытий микрокапиллярных реакторов для селективного гидрирования ацетиленовых спиртов.

Пути обеспечения качества нанокomпонентов энергоёмких композитов

Павловец Г.Я., Мелешко В.Ю., Домалега М.Г., Тихомирова М.А.
ВА РВСН имени Петра Великого, г. Москва

Обоснованы требования к качеству нанодисперсных компонентов энергоёмких композитов, обладающих пирофорностью, склонностью к агломерации и гигроскопичностью, и определены мероприятия, обеспечивающие воспроизводимость контролируемого химического и фракционного состава нанопорошков.

Кинетическое исследование и моделирование окисления метиллинолеата в мицеллах

Плисс Е.М.
ЯрГУ им. П.Г. Демидова, Ярославль

Представлены экспериментальные данные и результаты компьютерного моделирования радикально-цепного окисления метиллинолеата в мицеллах в

режиме неингибированного процесса и в присутствии нитроксильных радикалов и гидроксиламинов различных классов.

Фотохимия комплексов Fe(III) с производными салициловой кислоты

Поздняков И.П., Гривин В.П., Плюснин В.Ф.
ИХКГ СО РАН, Новосибирск

Методами оптической спектроскопии, стационарного и наносекундного импульсного фотолиза исследованы состав и фотохимия комплексов Fe(III) с рядом производных салициловой кислоты. Для данных комплексов определены активные промежуточные частицы и квантовые выходы фотолиза, показана их высокая фотохимическая устойчивость.

Моделирование компонентов солнечных элементов, сенсibilизированных красителем, с помощью современных методов квантовой химии

Поляков И.В.¹, Ермилов А.Ю.¹, Немухин А.В.^{1,2}

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

В данной работе мы применили современные методы квантовой химии (ХМСQDPT, TDDFT, FMO) для моделирования системы краситель-кластер диоксида титана, при этом в качестве хромофора использовалась 2-циано-5-(4-диметиламинофенил) пента-2,4-диеновая кислота, кластер диоксида титана был взят по мотиву анатаза.

Кинетика сверхбыстрого фотоиндуцированного переноса электрона из второго возбужденного состояния

Рогозина М.В., Иванов А.И.
ВолГУ, Волгоград

В докладе обсуждается влияние результатов, полученных для процессов переноса электрона из второго возбужденного состояния в рамках многоканальной стохастической модели, на общие представления о механизме процессов переноса заряда.

Новые подходы к генерированию и применению индуцированной параводородом поляризации ядер при использовании гетерогенных каталитических систем

Сальников О.Г.^{1,2}, Коптюг И.В.^{1,2}, Ковтунов К.В.¹

1. МТЦ СО РАН, Новосибирск

2. НГУ, Новосибирск

Предложены новые подходы к получению гиперполяризованных веществ с использованием параводорода, основанные на гетерогенном гидрировании на металлокомплексах, массивных металлах и оксидах. Метод ИППЯ использован для изучения механизмов гидрирования α,β -ненасыщенных карбонильных соединений и кинетики гидрирования пропена.

Детектирование и мониторинг возбужденных биомолекул голографическими методами.

Семенова И.В., Васютинский О.С.

ФТИ им. А.Ф.Иоффе, Санкт-Петербург

В докладе рассматриваются возможности методов голографической интерферометрии, в том числе с цифровой регистрацией, применительно к исследованию процессов безызлучательной релаксации биологических молекул. Проведен сравнительный анализ этих методов на примере детектирования молекул синглетного кислорода.

Особенности формирования смешанных адсорбционных слоев на поверхности металлов с участием простых молекул

Смирнов М.Ю.

ИК СО РАН, Новосибирск

Методами СПЭЭВР и ТПР исследовано формирование смешанных адсорбционных слоев с участием простых молекул на поверхностях Pt(111) и Pt(100). Рассмотрены адсорбция с конкуренцией за места определенного типа, межмолекулярное взаимодействие в смешанном адсорбционном слое.

Получение гетеромодульных керамических композитов на основе сиаионов в процессе фильтрационного горения.

Смирнов К.Л.

ИСМАН, г. Черноголовка

В работе представлены закономерности получения при фильтрационном горении гетеромодульных керамических композитов в системе SiAlON–BN. Установлены основные факторы определяющие плотность и фазовый состав синтезированных керамических материалов и исследованы их свойства.

Электропроводность пленок оксида графита

Смирнов В.А., Денисов Н.Н., Шульга Ю.М.
ИПХФ РАН, Черноголовка

Исследована электропроводность пленок оксида графена в диапазоне относительной влажности 30-100%. Выявлен протонный характер проводимости с энергией активации $E \approx 0.6$ эВ.

Воспламенение водородо-воздушной смеси вблизи нижнего концентрационного предела

Смыгалина А.Е., Иванов М.Ф., Киверин А.Д.
ОИВТ РАН

В работе методами численного моделирования проводится определение условий для воспламенения водородо-воздушной смеси в диапазоне температур и малых концентраций горючего. Предложен подход для оценки предела, основанный на процессе распространения спонтанной волны горения вдоль градиента концентрации. Найденные критерии воспламенения непосредственно проверяются с использованием расчетов по наблюдению за развитием горения.

Надмолекулярная структура и механические свойства реакторных смесей на основе СВМПЭ и сополимеров этилен/гексен-1.

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

Реакторным методом получены полимерные смеси на основе СВМПЭ и сополимеров этилен/гексен-1 различного состава. Показано, что надмолекулярная структура и механические свойства РС зависят не только от содержания в реакторных смесях СЭГ, но и в значительной степени от состава и морфологии модифицирующего СЭГ.

Экспериментальное преодоление катастрофы ошибок: формирование линейных гомохиральных супрамолекул макроскопической длины в среде, исходно слабо отклонившейся от рацемической

Скоблин А.А.¹, Литвин Я.А.¹, Щеголихин А.Н.², Зленко Д.В.³, Стовбун С.В.¹

¹ИХФ РАН, Москва

²ИБХФ РАН, Москва

³МГУ имени М.В. Ломоносова, Биологический факультет, Москва

Экспериментально показано, что слабо отклонившийся от рацемического состояния раствор способен спонтанно перейти в гомохиральное состояние за счет физико-химической аннигиляции антиподов, а в сформированном гомохиральном растворе могут формироваться линейные гомохиральные макромолекулы макроскопической длины.

Новые перфторкарбоксилатные комплексы платины(4+) - катализаторы окислительной этерификации алканов

Столяров И.П., Чураков А.В., Столярова В.П.

ИОНХ РАН, Москва

Синтезированы новые перфторкарбоксилатные комплексы Pt(4+) $Pt(R_fCOO)_4$ и $M_2[Pt(R_fCOO)_6]$, где $R_f = CF_3, C_2F_5$; $M = Li, Na, K, Cs, Rb$ и NMe_4 . В мягких условиях (20-100°C) в присутствии окислителей в среде CF_3COOH они катализируют окисление метана до метилтрифторацетата, n-алканов C2-C7 в смесь изомерных втор-алкилтрифторацетатов.

Исследование реакций инициирования H_2/O_2 в ударных волнах.

Власов П.А.^{1,2}, Зиборов В.С.³, Смирнов В.Н.¹, Тереза А.М.¹

¹ИХФ РАН, Москва.

²НИИЯУ «МИФИ», Москва.

³ОИВТ РАН, Москва

Проведено экспериментальное исследование кинетики инициирования смеси $H_2/O_2/Ar$ в ударных волнах с использованием абсорбционно-эмиссионных методик регистрации ОН. Численное моделирование собственных экспериментальных результатов и литературных данных позволило выявить соотношение первичных каналов инициирования смеси H_2/O_2 .

Закономерности образования сшитой структуры в нанокompозитных связующих на основе терморективных эпоксидных смол и nanoалмазной шихты

Тикунова Е.П.¹, Костина Ю.В.², Яблокова М.Ю.³, Куркин Т.С.¹, Озерин А.Н.¹

¹ ИСПИМ РАН, Москва

² ИНХС РАН, Москва

³ МГУ, Москва

В работе приводятся результаты количественного описания влияния алмазной шихты (АШ) детонационного синтеза на процесс отверждения эпоксидных связующих различного состава и предлагается модельная схема взаимодействия частиц АШ со всеми компонентами отверждаемого связующего.

Разработка и исследование токопроводящих чернил для струйной печати на основе наночастиц серебра

Титков А.И., Юхин Ю.М., Ляхов Н.З.

ИХТТМ СО РАН, Новосибирск

Разработаны и исследованы токопроводящие чернила для струйной печати на основе наночастиц серебра, с их содержанием более 50 масс. %. Проведена печать тестовых изображений на лабораторном струйном принтере, оснащенный промышленной мелкокапельной печатной головкой, и исследованы их структурные и электрические свойства. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, проект № 13-03-12157-офи_м.

Метод релятивистского псевдопотенциала для расчета молекул, кластеров и твердых тел с тяжелыми атомами: почему он работает?

*Титов А.В.^{1,2}, Мосягин Н.С.^{1,2}, Петров А.Н.^{1,2}, Скрипников Л.В.^{1,2},
Зайцевский А.В.^{1,3}*

1. СПбГУ, Санкт-Петербург

2. ФГБУ «ПИЯФ», Гатчина

3. НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Обсуждаются основы метода релятивистского псевдопотенциала, РПП (эффективного потенциала остова), исторические аспекты его становления и современный статус теории. Показано, что теория радиально-локального РПП может быть построена на основе двух условий: «жесткости» РПП в остова области ($r < R_c$) и его «физичности» в валентной области ($r > R_c$).

Модуляция кинетики миозина координированными двухвалентными ионами.

Ткачев Я.В.^{1,2}, Ge J.², Неграшов И.В.², Несмелов Ю.Е.²

1. ИМБ РАН, 119991, г. Москва

2. University of North Carolina, Charlotte 28223, 9201 University City Blvd, US

Проведено исследование кинетики различных стадий акто-миозинового цикла в присутствии двухвалентных ионов Mg^{2+} , Mn^{2+} и Ca^{2+} . Установлено, что замена Mg^{2+} на другой ион ведет к изменению лимитирующей стадии АТФазного цикла, не влияя на активацию АТФазы в присутствии актина.

EXAFS-исследование соединения К-Ві-цитрат (Де-Нол) в твердой форме и водных растворах различной концентрации

Трубина С.В.¹, Эренбург С.Б.¹, Юхин Ю.М.²

¹ИНХ СО РАН, Новосибирск

²ИХТТМ СО РАН, Новосибирск

Проведено сравнительное исследование структуры К-Ві-цитрат в водных растворах различной концентрации и твердых формах. Установлено, что в растворах ближайшее окружение атома висмута составляют девять, а в твердых комплексах три атома кислорода на различном расстоянии. В твердой фазе комплексы являются аморфными.

Получение синтез-газа газа и водорода методом углекислотного и парового риформинга метана и продуктов ферментации на пористых керамических Ni-Co-содержащих мембранах

Федотов А.С.¹, Антонов Д.О.¹, Цодиков М.В.¹, Басов Н.Л.¹, Уваров В.И.²

¹ИНХС РАН, г. Москва

²ИСМАН РАН, г. Черноголовка, МО

Разработаны оригинальные пористые керамические мембранно-каталитические Ni-Co-содержащие системы для высокоэффективных процессов углекислотного и парового риформинга метана и основных продуктов ферментации в синтез-газ. Изучены структурные особенности мембран и их влияние на характер протекания указанных процессов.

Парамагнитные комплексы никеля в каталитических реакциях формирования и разрыва С-С-связи

Флид В.Р., Шамсиев Р.С., Дураков С.А., Мельников П.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 аммиака с борорганическими наночастицами нанесенными на различные подложки.

Харитонов В.А., Гришин М.В., Гатин А.К., Слуцкий В.Г., Шуб Б.Р.
ИХФ РАН, Москва

Установлено, что при взаимодействии аммиака с поверхностью БОН происходит его распад на водород и азот. Данные туннельной спектроскопии свидетельствуют о сохранении электронного строения БОН в течение эксперимента. При этом наибольший выход азота по отношению к аммиаку в газовой фазе наблюдается при нанесении БОН на ВУПГ

Термоэлектрическая эффективность наноструктурированных материалов

Харламов Ф.В., Харламов В.Ф.
ФГОУ ВПО «Госуниверситет УНПК», 302020, Орел

Термоэлектрическая эффективность рассмотренных в работе наноструктурированных материалов $Z = 10 - 100$ существенно превышает экспериментальные значения $Z \leq 2$ для однородных полупроводников и обусловлена отсутствием фононной компоненты теплопроводности, а также скачком температуры в области точечных контактов между частицами материалов.

Поляризация мелкодисперсных диэлектриков при хемосорбции водорода

Сергеев В.О., Соколов А.А., Харламов В.Ф.
ФГОУ ВПО «Госуниверситет УНПК», Орел

Обнаружено: в атмосфере водорода ($P_h = 3 \cdot 10^4$ Па) при температуре 150 - 245°C слой мелкодисперсного $CsNO_3$, $KMnO_4$, $Pb(NO_3)_2$ самопроизвольно переходит в состояние поляризации, при этом в слое возникает электрическое поле до 2 В/мм и происходит увеличение до 10^6 квазистатической диэлектрической проницаемости слоя порошка.

Последствия взаимодействия ударных волн с неплоскими поверхностями в водородсодержащих смесях

Хомик С.В., Максимова О.Г., Медведев С.П.
ИХФ РАН, Москва

Представлен анализ и обобщение полученных авторами результатов исследования фокусировки ударных волн в водородсодержащих смесях на неплоских отражающих поверхностях. Показано наличие широкого спектра взрывных процессов инициируемых у неплоского торца и определено влияние интенсивности ударной волны на возможность их реализации.

PELDOR в исследованиях ДНК и РНК

Цветков Ю.Д., Милов А.Д., Кузнецов Н.А.¹, Федорова О.С.¹
ИХКГ СО РАН, Новосибирск
¹ ИХБФМ СО РАН, Новосибирск

Сведения о расстояниях и спектрах расстояний между спиновыми метками, полученные методом PELDOR, позволили сделать заключения о строении различных ДНК(РНК)- структур.

Флуктуационный механизм наноконденсации в сверхкритическом CO₂.

Чайкина Ю.А.
ИХФ РАН, Москва.

Экспериментальные данные по критическому уширению в сверхкритическом CO₂ вынуждают нас отказаться от локальных флуктуаций плотности как механизма критической опалесценции CO₂ и связать этот механизм с случайной локальной наноконденсацией, вызванной нетермодинамическими флуктуациями температуры.

Pt-содержащие катализаторы в процессах переработки продуктов биомассы

Чистяков А.В., Губанов М.А., Жарова П.А., Мурзин В.Ю., Цодиков М.В.
ИНХС РАН, Москва

В работе изучен ряд моно- и биметаллических Pt-содержащих катализаторов в реакциях конверсии спиртов и триглицеридов жирных кислот в углеводороды различных классов. Охарактеризована стабильность работы

наиболее активных систем, изучено влияние условий процесса на селективность образования углеводородов и выявлены корреляции между структурой активных центров и их каталитическими свойствами.

Молекулярная организация и комплексообразование в гибридных металл-мезогенных наносистемах

Шабатина Т.И.

Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва

Гибридные металл-мезогенные наносистемы на основе ряда жидкокристаллических производных, включающие кластеры серебра и меди, получены совместной конденсацией паров компонентов. Структурная организация наносистем определяется конкуренцией процессов комплексообразования и упорядочения молекул матрицы.

Обобщённое соотношение Поляни-Семёнова.

Шестаков А.Ф.

ИПХФ РАН, г. Черноголовка.

Обосновано двухпараметрическое нелинейное обобщённое соотношение Поляни-Семёнова, связывающее энергию активации E_a с тепловым эффектом реакции ΔH . Разработанный теоретический подход для определения коэффициента перед квадратичным членом апробирован для нескольких классов химических реакций.

Высокоупорядоченные пленки Лэнгмюра-Блоджетт на основе α, α' -диалкилкватротиофена и его силоксановых димеров: новые перспективные материалы для органической электроники

*Щербина М.А.¹, Бакиров А.В.², Агина Е.В.¹, Борщев О.В.¹, Лупоносов Ю.Н.¹,
Пономаренко С.А.¹, Чвалун С.Н.^{1,2}*

1. ИСПМ РАН, Москва

2. НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Получены линейные и разветвленные карбосилан-силоксаны, содержащие в своем составе как исключительно протонированные (полупроводимость p -типа), так и фторированные (полупроводимость n -типа) олиготиофеновые фрагменты. Исследованы их структура, фазовое поведение и фотооптические свойства, как в блочном состоянии, так и в тонких пленках. Работа отмечена Федоровской премией РАН 2012 года. Выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 12-03-00671)

Характеристики малых кластеров золота в образцах, содержащих молекулы кукурбит[*n*]урилов (*n* = 6, 7, 8), по EXAFS спектрам

*Эренбург С.Б.¹, Трубина С.В.¹, Коваленко Е.А.¹, Герасько О.А.¹,
Зайковский В.И.², Квашина К.О.³*

¹ИНХ СО РАН, Новосибирск,

²ИК СО РАН, Новосибирск,

³ID26, ESRF, Гренобль, Франция

Проведен синтез соединений включения наночастиц золота в молекулы кукурбит[*n*]урила (*n* = 6, 7, 8). Для синтезированных соединений в районе AuL_{III}-краев поглощения измерены спектры EXAFS-, XANES- и HERFD. Установлено, что во всех образцах золото находится в бидисперсном виде: 1) высокодисперсная часть золота внутри полостей кукурбитурила с узким распределением по размерам ($d \leq 1$ нм); 2) более крупные частицы золота.

Сверхбыстрая динамика разделения заряда в супрамолекулярных донорно-акцепторных системах

Михайлова В.А., Юданов В.В.
ВолГУ, Волгоград

В рамках нестационарной теории возмущений по параметрам электронной связи в пределе высоких температур исследована динамика сверхбыстрых фотоиндуцированных реакций переноса электрона в системе из донора и двух акцепторов.

Новые каталитические системы для процессов гидроочистки и деароматизации нефтяных фракции.

Юнусов М.П., Джалалова Ш.Б., Насуллаев Х.А., Исаева Н.Ф., Мирзаева Е.И., Гуломов Ш.Т.

Узбекский научно-исследовательский химико-фармацевтический институт им. А.С.Султанова, Республика Узбекистан. г. Ташкент

В настоящей работе изложены результаты исследований по разработке различных каталитических систем применительно к процессам с участием водорода, предназначенных для повышения качества и эффективности производства топлив и масел.

Получение наночастиц серебра, меди и сплавов на их основе для электроники экстракционно-полиольным методом

Юхин И.М., Ляхов Н.З., Титков А.И., Логутенко О.А.
ИХТТМ СО РАН, Новосибирск

Исследован процесс термического разложения монокарбосилатов серебра и меди в среде бензилового спирта или этиленгликоля и показана возможность получения порошков данных металлов, а также сплавов на их основе для электроники как микронного, так и субмикронного размера. Показана возможность получения порошкообразной меди, модифицированной серебром, в результате обработки меди раствором нитрата серебра в этиленгликоле в присутствии карбоновой кислоты. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, проект № 13-03-12157-офи_м.

Использование метода высокотемпературного ударного сжатия для получения фазы высокого давления нитрида кремния

Якушев В.В., Жуков А.Н., Уткин А.В., Рогачева А.И.
ИПХФ РАН, г. Черноголовка.

Приводятся данные по использованию метода высокотемпературного ударного сжатия для получения фазы высокого давления нитрида кремния из фаз низкого давления. Обсуждаются преимущества метода по сравнению с классическим подходом, основанном на добавлении в состав образцов медного порошка для закалки фазы высокого давления.

Структура и электронное строение наночастиц золота

Яржемский В.Г.
ИОНХ РАН, г. Москва

Рассчитаны структура и электронное строение наночастиц золота с лигандами SH, SiO₄H₃, а также клеточных наночастиц с центральными атомами Hf, W, Os, Pt, Hg. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными, обсуждаются модели функциональных свойств.

Принципы создания твердых и пластифицированных нанокомпозитных полимерных электролитов

Ярмоленко О.В.
ИПХФ РАН, Черноголовка

В докладе рассмотрены принципы создания различных нанокомпозитных полимерных электролитов. Нанопорошки неорганических оксидов (Al₂O₃, TiO₂, SiO₂, CeO₂, LiAlO₂ и др.) увеличивают проводимость, электрохимическую стабильность, механическую прочность и уменьшают сопротивление на электродной границе для разных типов электролитов.

Стендовые доклады

Компьютерное моделирование адсорбционного монослоя цис-карбоксифенил замещенного порфирина на поверхности Au(111)

Акименко С.С.¹, Горбунов В.А.¹, Мышляцев А.В.^{1,2}, Фефелов В.Ф.¹

1. ОмГТУ, Омск
2. ИППУ СО РАН, Омск

Разработана и исследована решеточная модель адсорбционного монослоя 5,15-бис(4-карбоксифенил)-15,20-бис(3,5-ди-трет-бутилфенил)порфирина на поверхности Au(111), учитывающая химическую структуру молекулы и направленный характер водородных связей, возникающих между карбоксильными группами.

Фотоника ряда комплексов дипирролилметенов

Аксенова Ю.В.¹, Ермолина Е.Г.¹, Буркова С.Л.², Кузнецова Р.Т.¹

1. ТГУ, Томск
2. ИГХТУ, Иваново

Изучены спектрально-люминесцентные свойства ряда новых эффективно излучающих флуорофоров (дифторборатов дипирролилметенов - BODIPY) различного строения. Исследованы генерационные характеристики комплексов в растворах и твердотельных матрицах. Обсуждаются возможности практического применения.

Векторные конструкции на основе катионных пептидов для внутриклеточной доставки ДНК и РНК молекул

Андреев С.М., Шиловский И.П., Маерле А.В., Хаитов М.Р.
ФГБУ "ГНЦ Институт иммунологии" ФМБА России, Москва

С целью создания эффективных транспортеров для доставки в клетки молекул ДНК и РНК синтезированы пептидные конструкции, представляющие собой позитивно заряженные линейные пептиды, липопептиды и дендримеры. Эффективность доставки зависела от суммарного заряда, способности пептида формировать амфифильные структуры, в то же время наибольшую активность в трансфекции проявляли дендримеры 3-й генерации на основе лизина и аргинина.

Гибридный мембранно-каталитический реактор для совместного получения синтез-газа и ультрачистого водорода в процессах углекислотного риформинга метана и этанола

*Антонов Д.О.¹, Федотов А.С.¹, Цодиков М.В.¹, Басов Н.Л.¹, Ярославцев А.Б.¹,
Уваров В.И.²*

¹*ИНХС РАН, г. Москва*

²*ИСМАН РАН, г. Черноголовка, МО*

Разработан оригинальный гибридный реактор на основе пористого керамического Ni-Co конвертера, совмещённого с Pd-содержащей мембраной для совместного получения синтез-газа и ультрачистого водорода в процессах углекислотного риформинга метана и этанола, а также изучены закономерности протекания этих процессов.

Модификация поверхности сверхвысокомолекулярного полиэтилена сверхкритическим CO₂*

*Афоничева О.В., Наумкин А.В., Краснов А.П., Саид-Галиев Е.Е.,
Николаев А.Ю., Волков И.О.
ИНЭОС РАН, Москва*

В работе обнаружено, что обработка СК-CO₂ способствует уменьшению количества групп CO_x и добавок, используемых в переработке полимеров. Показана связь между составом поверхности и трибологическими свойствами СВМПЭ, измеренными при малой нагрузке и скорости.

О природе расширения богатого предела распространения пламени в смесях метана с воздухом при повышении начального давления

*Бунев В.А., Большова Т.А., Бабкин В.С.
ИХКГ СО РАН, г. Новосибирск*

Показано, что значительное расширение богатого предела в смесях метана с воздухом с повышением начального давления обусловлено наличием в пламени богатых смесей метана сверхадиабатических температур, а предел определяются максимальными значениями температур и ее градиентами во фронте пламени.

Зона дермо-эпидермального контакта кожи человека в разные возрастные периоды

Багаева М.И.¹, Брагина Е.Е.², Гетлинг З.М.¹, Гомберг М.А.³, Стовбун С.В.¹

1. ИХФ РАН, Москва
2. НИИ ФХБ им. А.Н.Белозерского МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва
3. МГМСУ, Москва

Старение кожи связано с изменениями в зоне дермо-эпидермального контакта. Деградация квазиполимерного матрикса базальных мембран, приводящая к их несостоятельности и патологическим изменениям в органах и тканях может быть связана с уровнем микробиологической нагрузки.

**Водная нанодисперсия фуллерена C₆₀ проявляет
противовоспалительную активность в модели atopического дерматита
на мышах**

Башкатова Е.Н., Шершакова Н.Н., Пургина Д.Д., Хаитов М.Р., Андреев С.М.
ФГБУ "ГНЦ Институт иммунологии" ФМБА России, Москва

Изучено влияние водной нанодисперсии фуллерена на реакцию atopического дерматита, индуцированную овальбумином (OVA) у мышей. Введение nC₆₀ оказывает существенное противовоспалительное действие (особенно при применении эпидермальных аппликаций), одновременно с ослаблением внешней патологии реакции.

**Получение биологически активных систем с помощью
низкотемпературного химического переноса веществ**

- Григорян Г.Л.¹, Бегларян А.А.¹, Арутюнян А.Б.², Петросян А.О.¹*
1. Ереванский государственный университет, Ереван
 2. Институт химической физики им. А.Б. Налбандяна НАН РА, Ереван

Используя низкотемпературный химический перенос оксида меди (II) с помощью пероксида водорода, поверхность кварцевого стекла покрывали частицами CuO и испытывали эту систему в процессе ингибирования бактерии E-coli. Полученные результаты показывают, что новый способ получения антибактериальных систем может иметь большую перспективу.

**Влияние структурных особенностей SiO₂ на гидротермальный синтез
силикатов кальция**

- Зулумян Н.О.¹, Исаакян А.Р.¹, Бегларян А.А.², Габриелян А.А.¹, Терзян А.М.¹*
1. Институт общей и неорганической химии НАН РА, г. Ереван
 2. Ереванский государственный университет, Ереван

На основе кремнезема, состоящего в основном из метасиликатных цепочек, с помощью простой двухчасовой гидротермальной обработки системы $\text{SiO}_2\text{--Ca(OH)}_2\text{--H}_2\text{O}$ при 80°C при атмосферном давлении удалось получить такие гидро- и гидроксосиликаты кальция, нагрев которых уже при $800\text{--}830^\circ\text{C}$ инициирует синтез игольчатого $\beta\text{-CaSiO}_3$, а также частично Ca_2SiO_4 .

Роль кислородных радикалов в реакции окислительного дегидрирования пропана на поверхности VO_x/TiO_2 катализаторов

Бедило А.Ф.^{1,2}, Авдеев В.И.¹, Кенжсин Р.М.¹

1. ИК СО РАН, Новосибирск
2. НТИ МГУДТ, Новосибирск

Проведено квантовохимическое моделирование механизма реакции окислительного дегидрирования пропана на кислородных радикалах на поверхности VO_x/TiO_2 катализатора. Показано, что на таких активных центрах реакция может протекать с невысокой энергией активации ~ 50 кДж/моль, близкой к экспериментальным значениям.

Развитие методов цифровой голографии для детектирования синглетного кислорода

Белашов А.В.¹, Петров Н.В.², Семенова И.В.¹, Васютинский О.С.¹

1. ФТИ им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург
2. НИУ ИТМО, Санкт-Петербург

Рассмотрен новый способ детектирования синглетного кислорода, посредством регистрации температурного градиента, возникающего в результате безызлучательной релаксации в основное состояние. Экспериментально реализован и апробирован метод восстановления волнового фронта для измерения градиента температуры.

Электроформование нетканых материалов из расплава полиамида-6 с добавками стеаратов магния, кальция и цинка

Белоусов С.И.^{1,2}, Малахов С.Н.^{1,2}, Чвалун С.Н.²

1. НИФХИ им. Л.Я. Карпова, Москва
2. НИЦ Курчатовский институт, Москва

В докладе обсуждается принцип введения и механизм влияние малых добавок стеаратов магния, кальция и цинка при получении микро и

нановолокнистых нетканых материалов методом электроформования из расплава полимера. Работа выполнена при поддержке РФФИ. Проект № 12-03-00051-а

Электрореологические жидкости на основе гидрозолей детонационных наноалмазов и суспензий монтмориллонитовых глин в полидиметилсилоксановых маслах

Столярова Д.Ю.^{1,2}, Белоусов С.И.², Чвалун С.Н.^{1,2}, Алексенский А.Е.³,
Вуль А.Я.³

1. ИСПМ РАН, Москва
2. НИЦ Курчатовский институт, Москва
3. ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург

Электрореологические жидкости (ЭР) являются материалами, реологические и механические свойства которых (вязкость, предел текучести, модуль сдвига, и др.) изменяются при наложении внешнего электрического поля. В докладе обсуждаются и сравниваются свойства гидрозолей детонационных наноалмазов и суспензий монтмориллонитовых глин в полидиметилсилоксановых маслах в качестве ЭР.

Изучение закономерностей нитрования имидазола

Белых С.И., Ляпунова М.В., Мальков В.С.
ЛКИ ТГУ, Томск

В работе рассмотрен процесс нитрования имидазола для получения 4(5)-нитроимидазола. Проведена серия синтезов с целью изучения закономерностей протекания реакции нитрования. В качестве нитрующего агента была выбрана азотнокислая соль натрия. Выход продукта составил 68 %.

Исследование безызлучательных переходов при лазерной генерации синглетного кислорода в воде.

Бельтюкова Д.М.^{1,2}, Семенова И.В.¹, Васютинский О.С.¹
¹ФТИ им. А.Ф.Иоффе, Санкт-Петербург
²СПбГПУ, Санкт-Петербург

Работа посвящена применению метода голографической интерферометрии к исследованию безызлучательных переходов при генерации синглетного кислорода в воде. Были получены двумерные времязависящие

пространственные распределения изменений показателя преломления по всей исследуемой области.

Свойства и структура кластеров Mg_2 - Mg_{32} и их взаимодействие с $EtBr$ в вакууме

Беляев С.Н., Пантелеев С.В., Игнатов С.К.
ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

Методом функционала плотности был исследован механизм реакции образования реактива Гриньяра. Определены энергетические и термодинамические параметры реакций образования малых кластеров магния Mg_2 - Mg_{32} . Выполнен расчет термодинамических характеристик различных стадий реакции образования реактива Гриньяра.

Кинетическое исследование механизма аэробной полимеризации стирола в присутствии ароматического нитроксильного радикала

Березин М.П.¹, Тихонов И.В.², Плисс Е.М.³
1. ИПХФ РАН, г. Черноголовка
2. ЯФ ФТИ РАН, г. Ярославль
3. ЯрГУ им. П.Г. Демидова, г. Ярославль

Методами микрокалориметрии, микровольмометрии и спектроскопии ЭПР исследованы реакции алкильных и пероксильных радикалов стирола с 4,4'-диметоксидифениламин-1-оксидом и предложен механизм процесса. Основу которого составляют реакции указанных радикалов с ароматическим нитроксидом и образующимся из него нитроном.

Комплексообразование гидропероксидов с бромидами тетраалкиламмония

Берестнева Ю.В., Ракиша Е.В., Туровский Н.А.
Донецкий национальный университет, Донецк

В работе методом ЯМР 1H спектроскопии исследовано взаимодействие гидропероксидов *трет*-бутила и 1,1,3-триметил-3-(4-метилфенил)бутила с бромидом тетраалкиламмония (Et_4NBr , Pr_4NBr , Bu_4NBr). Определены термодинамические параметры комплексообразования. Показано, что стабильность комплексов гидропероксид – бромид тетраалкиламмония уменьшается с увеличением собственного объема катиона соли.

Синтез, структура и свойства новых представителей семейства каликс[4]аренсодержащих [MnII₂ MnIII₂] кластеров

*Алдошин С.М.^а, Антипин И.С.^б, Соловьева С.Е.^б, Юрьева Е.А.^а, Санина Н.А.^а,
Корчагин Д.В.^а, Шилов Г.В.^а, Утенышев А.Н.^а, Боженко К.В.^а*

^а ИПХФ РАН, Черноголовка,

^б ИОФХ КНЦ РАН, Казань

Получены и исследованы экспериментально (РСА, СКВИД магнетометрия) и квантово - химически новые представители каликс[4]аренсодержащих тетраядерных комплексов марганца типа [Mn₂III Mn₂II] с пиридиновым и дипиридиновым бидендатным лигандами, координированными в экваториальной плоскости комплекса.

Влияние СВЧ излучения на процесс твердофазной активации гиббсита и свойства получаемых продуктов

Болотов В.А., Жужгов А.В., Танашев Ю.Ю., Криворучко О.П.
ИК СО РАН, Новосибирск

Рассмотрены ключевые особенности использования метода СВЧ нагрева с целью активации кристаллического гиббсита (γ -Al(OH)₃). Исследованы свойства исходных, промежуточных и конечных продуктов твердофазного разложения ГБ. Предложен возможный механизм СВЧ активации, заключающийся в предпочтительном инициировании процессов разрыва Н-связей между кислородными пакетами в объеме кристаллов ГБ и отщеплении протонов, а также в ускорении их миграции по поверхности и в объеме твердой фазы.

Взаимодействие фталоцианин–фуллерен в контексте химии материалов

Боровков Н.Ю., Губарев Ю.А., Лебедева Н.Ш., Колкер А.М.
ИХР РАН, г. Иваново

Прямое взаимодействие фталоцианин–фуллерен не представляет практического интереса. Фотовольтаический композиционный материал фталоцианин–фуллерен целесообразно формировать как систему хозяин–гость, структура которой задана фталоцианиновым компонентом.

Влияние нанопластин графита на процессы пиролиза, термоокислительной деструкции и горения полиэтилена

Бревнов П.Н.¹, Юхаева Г.Р.¹, Крашенинников В.Г.¹, Ломакин С.М.², Монахова Т.В.², Коверзанова Е.В.¹, Усачев С.В.¹, Новокшонова Л.А.¹

¹ИХФ РАН, Москва

²ИБХФ РАН, Москва

Хромато-масс-спектрометрический анализ продуктов пиролиза нанокмозитов на основе ПЭ и нанопластин графита показал, что наполнитель оказывает значительное влияние на состав продуктов пиролиза, повышая содержание тяжелых УВ. В процессе термоокисления ПЭ нанопластины оказывают антиокислительное действие.

Антивирусные и иммуномоделирующие свойства полиоксометаллатов Кеггина

Буданов Б.А.¹, Ковалевский С.А.¹, Балашов Е.М.¹, Далидчик Ф.И.¹, Мезенцева М.В.², Исаева Е.И.², Лопатина О.А.², Суетина И.А.², Бакланова О.В.²

1. ИХФ РАН, Москва

2. НИИ вирусологии им. Д.И. Ивановского, Москва

Установлены антивирусные и иммуномодулирующие свойства полиоксометаллатов Кеггиновского типа. Методом сканирующей туннельной спектроскопии изучено электронное строение этих соединений. Полученные результаты указывают на преобладающую роль неэлектронного (атомного) механизма, формирующего эти свойства.

Синтез, спектрально-люминесцентные и фотохимические свойства ковалентно-связанных диад на основе 2-стирилхинолина и 6-гидрокси-2-нафтойной кислоты

Гавришова Т.Н., Будыка М.Ф., Карнов О.Н., Ли В.М., Поташова Н.И.
ИПХФ РАН, г. Черноголовка

При возбуждении светом бихромофорных ковалентно-связанных диад, в которых хромофорные группы 2-стирилхинолина (SQ) и 6-гидрокси-2-нафтойной кислоты (Np) связаны диоксиполиметиленовым мостиком, наблюдается перенос энергии с Np на SQ группу, фотоизомеризация SQ группы и изменение соотношения показателей кислотности двух групп.

Исследование кинетики полимеризации *n*-ксилилена в процессе криохимического синтеза

Бузин А.И.¹, Стрельцов Д.Р.¹, Дмитрияков П.В.², Kamasa P.³, Чвалун С.Н.^{1,2}

1. ИСПМ РАН, Москва
2. НИЦ «Курчатовский институт», Москва
3. ISSPO Wigner RCP HAS, Budapest

Проведено исследование кинетики полимеризации *n*-ксилилена методом ДСК. Используя изоконверсионные методы сделана оценка эффективной энергии активации от степени конверсии мономера. Определены значения предэкспоненциального множителя. Для каждой экспериментальной кривой были построены модели реакции $f(\alpha)$.

Некоторые аспекты термической деструкции полиметилденфталита

Бузин М.И.¹, Ильина М.Н.¹, Здвижков А.Т.², Каграманов Н.Д.¹, Клеменкова З.С.¹, Салазкин С.Н.¹, Папков В.С.¹

- ¹ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН, г. Москва
- ²ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН, г. Москва

Методами ТГА, масс-спектрометрии, ИК-спектроскопии исследована термическая деструкция полиметилденфталита. Рассчитана энергия активации термической деструкции ПМФ - 280 кДж/моль, что несколько превышает величину этого параметра для виниловых полимеров.

Электрет на основе полимерного композита

Никитина Л.В., Бусыгина Е.А.
СГТУ им. Гагарина Ю.А., г. Саратов

Работа посвящена получению композиционных электретных материалов с заданными свойствами, состоящих из полимерного связующего и дисперсного наполнителя, и изучению их электрических свойств.

Слабые водородные связи в адсорбции нежестких молекул ароматических спиртов и аминов

Варфоломеева В.В., Терентьев А.В.
СГАУ, Самара

Методом ВЗЛР/ауг-сс-рVDZ и молекулярно-статистической теорией адсорбции определены структурно-энергетические характеристики молекул бензилового спирта, 2-фенилэтанола и 2-фенилэтиламина при адсорбции на

ГТС. Возможность образования водородной связи рассматривалась при использовании метода нековалентных взаимодействий (NCI).

Электронная структура и таутомерия производных цитозина по данным квантовохимических пропагаторных расчетов и фотоэлектронной спектроскопии

Сошников Д.Ю.¹, Московская Т.Э.², Витковская Н.М.², Ларионова Е.Ю.², Трофимов А.Б.^{1,2}

¹ ИрИХ им. А. Е. Фаворского СО РАН, Иркутск

² ИГУ, Иркутск

Спектры валентной ионизации 5-метилцитозина, 5-фторцитозина и изоцитозина рассчитаны в рамках метода ADC(3) для одночастичной функции Грина (электронного пропагатора) для различных таутомерных форм этих молекул в целях интерпретации новых экспериментальных данных и анализа эффекта заместителя на таутомерный состав.

DFT моделирование реакции окисления диметилсульфида пероксо-соединениями

Пастернак Е.Н., Водолазкина Д.А.
Донецкий национальный университет, Донецк

Анализируется влияние структуры пероксосоединений в реакции окисления DMS в рамках DFT функционала B3LYP в базисе 6-31+G(d,p).

Субстрат	Окислитель	ΔH^\ddagger , ккал/моль	Мнимая частота TS, см^{-1}
$(\text{CH}_3)_2\text{S}$	$^-\text{OSi}(\text{O})\text{OOH}$	29.9	427.1i
$(\text{CH}_3)_2\text{S}$	$^-\text{OC}(\text{O})\text{OOH}$	24.9	384.6i

Спектральные свойства и ИК-люминесценция примеси иона Bi^{3+} в кристалле CsCdCl_3

Втюрина Д.Н.¹, Романов А.Н.^{2,5}, Вебер А.А.³, Фаттахова З.Т.¹, Кузнецов М.С.⁴, Зараменских К.С.⁴, Лисицкий И.С.⁴, Корчак В.Н.¹, Цветков В.Б.³, Сулимов В.Б.^{2,5}

1. ИХФ РАН, Москва,
2. НИВЦ МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва,
3. ИОФ РАН, Москва,
4. ОАО "Гиредмет" ГНЦ РФ, Москва,
5. ОАО "Димонта", Москва

Рассматривается получение и оптические свойства монокристаллических образцов CsCdCl_3 , легированных ионами одновалентного висмута. Показана взаимосвязь между составом, условиями получения и люминесцентными свойствами, позволяющая получить новые данные о химической природе оптически-активных низковалентных висмутсодержащих центров.

Катализируемое палладием конструирование четвертичного асимметрического атома углерода

Гаврилов В.К., Бочелюк М.С., Максимова М.Г., Чучелкин И.В.
РГУ имени С.А. Есенина, г. Рязань

С участием неизвестных ранее P^*,P^* -бидентатных диамидофосфитов осуществлено асимметрическое алкилирование циннамилацетата этил 2-оксоциклогексанокарбоксилатом с образованием кетоэфира, содержащего четвертичный C^* -стереоцентр. При этом достигнуто до 85% *ee* при количественной конверсии исходного субстрата.

Синтез, структура и свойства органоминеральных сорбентов.

*Гаврилов Ю.А.¹, Плетнева И.В.¹, Мешкова И.Н.¹, Мельников В.П.¹,
Бревнов П.Н.¹, Горенберг А.Я.¹, Никашина В.А.²*

1. ИХФ РАН им. Н.Н. Семенова, г. Москва
2. ГЕОХИ им. В.И. Вернадского, г. Москва

Исследованы синтез, структура, сорбционные и ионно-обменные свойства адсорбентов и каталитических носителей на основе углей и природных цеолитов, модифицированных политетрафторэтиленом (ПТФЭ).

Изучение эффектов коллективного взаимодействия в нанокластерах коллоидных квантовых точек CdSe

Гак В.Ю., Спиринов М.Г., Бричкин С.Б., Разумов В.Ф.
ИИХФ РАН, Черноголовка

Методами стационарной и пикосекундной времяразрешённой флюоресцентной спектроскопии, а также динамического светорассеяния, проведено детальное исследование влияния экспериментальных условий на размер и структуру нанокластеров коллоидных квантовых точек CdSe в растворах и особенности фёрстеровского резонансного переноса энергии в них.

Синтез фоточувствительных пленок $Cd_{1-x}Mg_xTe$ методом вакуумного напыления прекурсоров с последующим отжигом в активной атмосфере (PVD).

Болодурина А.И.¹, Гапанович М.В.², Ракитин В.В.², Новиков Г.Ф.²
¹ ФФФХИ МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва
² ИПХФ РАН, г. Черноголовка

В данной работе исследовано влияние условий отжига на фазовый состав, оптические свойства и фоточувствительность тонких пленок $Cd_{0.8}Mg_{0.2}Te$. Установлено, что для получения однофазных образцов n-типа с шириной запрещенной зоны ~ 1.7 эВ необходим отжиг прекурсоров > 180 мин при $T=550^\circ C$ в парах теллура и последующая обработка в парах $CdCl_2$.

Квантовохимическое изучение влияния молекулярной динамики на структуру и константы ядерного магнитного экранирования гетероциклических молекул

Аминова Р.М., Гатауллин А.Р.

Казанский федеральный университет, Институт физики, Казань

Применены методы молекулярной динамики (МД) для моделирования влияния динамических процессов на структуру и химические сдвиги (ХС) ряда гетероциклических молекул, структура которых была рассчитана в рамках теории DFT. Установлено, что ХС для протонов изменяются в пределах 0.29 – 2.27 м.д., для ядер ^{13}C – в пределах 1.13 – 131.4 м.д. что можно объяснить значительными изменениями двугранных углов в процессе МД.

Структура и свойства ориентированных пленок сверхвысокомолекулярного полиэтилена, полученных методом твердофазного непрерывного формования

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

1. ИСПИМ РАН, Москва

2. С. Петербургский филиал ИК СО РАН

3. ОАО "Красноярская химическая компания"

Данная работа посвящена изучению морфологии и свойств насцентного реакторного порошка сверхвысокомолекулярного полиэтилена, необходимых для обеспечения непрерывного процесса твердофазного формования ориентированных пленочных нитей СВМПЭ с высокими прочностными характеристиками.

Процессы, протекающие при низкотемпературном действии молекулярного брома на акриламид

Гордон Д.А., Кичигина Г.А., Михайлов А.И.
ИПХФ РАН, Черноголовка

Ранее было показано, что при простом смешении акриламида АА с хлором при низких температурах спонтанно образуются свободные радикалы, способные вести реакцию полимеризации АА. В настоящей работе показано, что при простом смешении АА с молекулярным бромом при низкой температуре протекают те же процессы, но менее эффективно.

Механоакустическая активация процесса получения гидроксиапатита

Горшенев В.Н.¹, Телешев А.Т.²

1. ИБФХ РАН, Москва
2. МПГУ, Москва

В работе рассматриваются основы технологии получения гидроксиапатита путем механоакустической активации реакционной смеси, состоящей из водных растворов диаммонийфосфата, нитрата кальция, гидроксида аммония. Технология позволяет сформировать наноразмерные частицы дисперсной фазы со средним гидродинамическим диаметром ≈ 22 нм.

Получение керамоматричного композита Ti_3SiC_2/SiC методом СВС-компактирования непорошковых слоевых композиций

Истомин П.В., Надуткин А.В., Грасс В.Э.
Институт химии Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар

Изложены физико-химические основы нового способа получения керамических композитов на основе Ti_3SiC_2 с использованием реакционных композиций листового титана и карбида кремния. Методом СВС-компактирования многослойного пакета регулярно уложенных листов титана и полимерной плёнки, наполненной частицами карбида кремния, получен керамический композит с матрицей $Ti_3SiC_2-TiSi_2$, армированной частицами SiC.

Модифицирование порошков карбида титана путём силицирования в газовой атмосфере SiO

Истомина Е.И., Истомин П.В., Надуткин А.В., Грасс В.Э.
Институт химии Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар

Предложен новый метод модифицирования порошков карбида титана, заключающийся в проведении высокотемпературной реакции TiC_x с газообразным монооксидом кремния. Установлено влияние состава исходного карбида титана и продолжительности его силицирования на состав конечных продуктов.

Зависимость магнитной проницаемости от магнитного поля ленточного аморфного магнитного материала.

Гребенчиков Ю.Б.¹⁾, Гудошников С.А.^{2,3)}, Прохорова Ю.В.²⁾

¹⁾Финансовый университет при правительстве России, Москва

²⁾ИЗМИРАН, Троицк, Москва

³⁾ООО Макриэл Системс, Троицк, Москва

Исследовалось поведение магнитной проницаемости ленточного аморфного ферромагнитного материала АМАГ-172 в малых магнитных полях. Подобраны аппроксимационные формулы $\mu(B)$ в ситуациях с размагничиванием и без него. По указанным формулам, рассчитаны параметры экранирующих устройств большого размера.

Влияние подложки на адсорбционные свойства единичных наночастиц золота

Гатин А.К.¹⁾, Гришин М.В.¹⁾, Дохликова Н.В.¹⁾, Николаев С.А.²⁾, Шуб Б.Р.¹⁾

¹⁾ИХФ РАН, Москва

²⁾Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва

Приведены результаты исследования взаимодействия наночастиц золота, нанесенных на графит и оксид кремния, с водородом и кислородом, полученные с помощью сканирующего туннельного микроскопа, Оже- и масс-спектрометров. Полученные результаты указывает на различную реакционную способность наночастиц золота, нанесенных на углеродные и оксидные подложки.

Эффект подложки при каталитическом разложении аммиака борорганическими наночастицами

Гатин А.К., Гришин М.В., Слуцкий В.Г., Харитонов В.А., Шуб Б.Р.
ИХФ РАН, Москва

Установлено, что вклад БОН в разложение аммиака увеличивается при замене подложек от SiO_2 на Al_2O_3 или на графит в 1.8 и 2.3 раза, соответственно. Было также обнаружено, что на SiO_2 БОН заряжаются

положительно, что, по-видимому, и приводит к понижению каталитической эффективности наночастиц на этой подложке.

Золотосодержащие катализаторы в процессах конверсии этанола

Губанов М.А., Чистяков А.В., Чудакова М.В., Мурзин В.Ю., Цодиков М.В.
ИНХС РАН, Москва

В работе представлены результаты по превращению этанола в присутствии моно и биметаллических золотосодержащих каталитических систем на основе $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ и цеолита ЦВМ со связующим $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. С использованием метода XAFS (XANES/EXAFS) спектроскопии исследованы взаимосвязь между структурными особенностями систем на основе $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ и их активностью и селективностью в изучаемых реакциях. Исследовано влияние модификации цеолитсодержащих систем различными компонентами на селективность в образовании алканов.

Газообразные продукты термического восстановления оксида графита при умеренных температурах

Гудков М.В., Гриднев А.А., Бехли Л.С., Мельников В.П.
ИХФ РАН, Москва

Простым волюмометрическим методом количественного анализа газообразных продуктов термического восстановления оксида графита (ОГ) были исследованы образцы ОГ различной степени окисления. На основе полученных результатов был предположен механизм восстановления системы сопряжения в ОГ.

Гидротриоксиды как инициаторы радикальной полимеризации

Федорова А.В.², Халитова Л.Р.¹, Гулмуродов К.С.², Грабовский С.А.¹, Рольник Л.З.², Кабальнова Н.Н.¹

1. ФГБУН ИОХ УНЦ РАН, Уфа
2. ФГБОУ ВПО УГНТУ, Уфа

Показано, что при термическом распаде гидротриоксида циклогексанола в ММА образуются олигомерные пероксиды ММА, которые являются эффективными инициаторами радикальной полимеризации ММА как в инертной атмосфере, так и в присутствии кислорода.

Особенности формирования и коллапса нанопористой структуры крейзов при деформировании волокон стеклообразного ПЭТФ в физически активных жидких средах

*Аржакова О.В., Долгова А.А., Зотов Д.А., Ложкин Б.А., Волынский А.Л.,
Бакеев Н.Ф.*

Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва

Методами оптической микроскопии и сканирующей электронной микроскопии исследованы особенности формирования и коллапса нанопористой структуры крейзов при деформировании волокон стеклообразного ПЭТФ в физически активных жидких средах по механизму крейзинга.

Моделирование взаимодействия водорода с нанокластерами золота.

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

В результате исследования системы Au_xH_y методами компьютерного моделирования в приближении DFT было обнаружено заметное локальное искажение исходной атомной структуры наночастицы при последовательной адсорбции водорода на вершинах кластера. Такое существенное изменение локальной плотности состояний в окрестности уровня Ферми системы может объяснить увеличения сопротивления наноконтакта СТМ, содержащего кластер золота.

Вычисление концентрационных пределов детонации жидких гомогенных взрывчатых систем

Гаранин В.А., Дубовицкий В.А., Нестеренко Д.А., Романова Л.Б.
ИПХФ РАН, г. Черноголовка.

В работе обобщены результаты крешерного способа экспериментального определения концентрационного предела детонации для бинарных систем на основе тетранитрометана и фторнитрометана. Найдена универсальная для ВВ с атомным составом $C_aH_bN_cO_dF_e$ линия, разделяющая плоскость пар безразмерных параметров (коэффициент избытка окислителя, теплота взрыва) на область детонирующих и не способных к детонации растворов.

Зондирование антибиотиков в водных растворах с помощью супрамолекулярных ансамблей триблоксополимеров с гексаядерным кластером молибдена.

*Елистратова Ю.Г.¹, Мустафина А.Р.¹, Бурилов В.А.², Соколов М.Н.³,
Федин В.П.³*

1. ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, г.Казань
2. Казанский федеральный университет, г.Казань
3. ИНХ СО РАН, г.Новосибирск

В результате взаимодействия с триблок-сополимерами предложен простой и удобный путь увеличения растворимости в воде кластера $[K(\text{diglyme})(\text{CH}_3\text{CN})]_2[\text{Mo}_6\text{I}_{14}]$, что позволило найти условия субстрат-индуцированной сенсibilизации люминесценции кластера за счет апикальной координации молекул-антенн, а именно дифлоксацина.

Интенсификация процесса фильтрационного горения

Жаворонков А.И., Жирнов А.А., Салганский Е.А.
ИПХФ РАН, Черноголовка

Работа посвящена экспериментальному исследованию интенсификации процесса фильтрационного горения углерода.

Реакция кросс-конденсации биооксигенатов в присутствии гетерогенных катализаторов

*Жарова П.А.¹, Чистяков А.В.¹, Губанов М.А.¹, Цодиков М.В.¹, Гехман А.Е.²,
Моисеев И.И.^{1,2}*

- 1 ИНХС РАН, Москва
2. ИОНХ РАН, Москва

Приведены результаты по новой реакции гетерогенно-каталитической кросс-конденсации углеродного остова этанола с рядом оксигенатов, содержащих 3 углеродных атома. Обнаружены наиболее перспективные сореагенты к этанолу (ацетон, глицерин), увеличивающие выход целевой фракции до 60 мас.% и оптимальные условия проведения реакции.

Теоретическое исследование структурных особенностей противомаларийных соединений

Жданова Е.С., Палько Н.Н., Тореева Н.А., Потемкин В.А., Гришина М.А.
ЧГМА, Челябинск

Произведен анализ бисчетвертичных аммониевых солей – эффективных противомаларийных соединений на величину их противомаларийной активности. Соединение, проходя через мембрану имеет свернутую конформацию с невысокой активностью, затем молекула разворачивается и встраивается в рецептор, проявляя большую активность на 0,01-3,81.

Палладиевые каталитические системы в процессах получения предшественников биоактивных препаратов.

*Жеглов С.В.¹, Гаврилов В.К.¹, Ширяев А.А.², Захаров С.И.¹, Новиков И.М.¹,
Зимарев В.С.¹*

1. ФГБОУ ВПО РГУ имени С.А. Есенина, г. Рязань
2. ФГБОУ ВПО РГРТУ, г. Рязань

Палладиевые каталитические системы на основе библиотек *P**-моно-, *P,N**- и *P,P**-бидентатных лигандов обеспечивают высокие результаты в модельных процессах синтеза важнейших энантиочистых и (или) энантиобогащенных прекурсоров при получении биоактивных препаратов нового поколения.

Использование метода атомно-силовой микроскопии для исследования функционального состояния митохондрий

Бинюков В.И., Миль Е.М., Жигачева И.В., Албантова А.А.
ИБХФ РАН, г.Москва

Методом атомно-силовой-микроскопии (АСМ) установлено, что совместное действие недостаточного увлажнения и умеренного охлаждения приводило к набуханию и уменьшению количества делящихся митохондрий. Обработка семян 2×10^{-12} М мелафеном предотвращала набухание митохондрий и сохраняла их способность к делению, что, вероятно, обусловлено антиоксидантными свойствами препарата.

Применение метода АСМ для изучения механизмов действия ферментов на модельных системах, содержащих краун-эфир, и структурных элементов клетки

Матиенко Л.И., Бинюков В.И., Миль Е.М., Жигачева И.В.
ИБХФ РАН, Москва.

Методом Атомно-Силовой Микроскопии (АСМ) установлено, что высокая эффективность комплексов $\text{Ni}_2(\text{OAc})_3(\text{acac})\text{МП} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ («А») (МП = N-метилпирролидон-2) и железа $\text{Fe}^{\text{III}}_x(\text{acac})_y 18\text{C}6_m(\text{H}_2\text{O})_n$ («В») ($18\text{C}6=18$ -краун-

б) в качестве катализаторов окисления алкиларенов может быть связана с формированием устойчивых супрамолекулярных структур за счёт Н–связей. Н-связи играют важную роль самоорганизации наноассоциатов биологически активных веществ с водой, как это происходит с мелафеном (регулятором роста растений).

Слоистые органические проводники на основе бис(этилендитио)тетрабромидов ванадия с анионами $[CdBr_4]$

Жилыева Е.И.¹, Дзюба К.А.², Флакина А.М.¹, Куликов А.В.¹, Любовская Р.Н.¹

1. ИПХФ РАН, Черноголовка

2. МГУ им. Ломоносова, факультет ФХИ, Москва

Получены новые слоистые проводники $(BEDT-TTF)_4CdBr_4$ (растворитель) (растворитель = C_6H_5F , C_6H_5Cl , C_6H_5Br , C_7H_7Cl , C_7H_7Br) с металлическим характером сопротивления вдоль проводящих слоев и полупроводниковым – поперек. Соединения $(BEDT-TTF)_3CdBr_{4-x}Cl_x$ и $(BEDT-TTF)_4Cd_3Br_{8-x}Cl_x$ – полупроводники. Работа поддержана программой №8 Президиума РАН.

Синтез нанокompозитов на основе СВМПЭ и монтмориллонита с применением катализаторов циглеровского типа

Заболотнов А.С.¹, Бревнов П.Н.¹, Крашенинников В.Г.¹, Новокшионова Л.А.¹,

Бакиров А.В.², Бабкина О.Н.³

¹ИХФ РАН, Москва

²ИСПМ РАН, Москва

³ИПХФ РАН, Черноголовка

Исследованы процессы хемосорбция компонентов металлоорганических катализаторов на основе хлоридов ванадия и титана на ММТ. Определены условия синтеза, обеспечивающие образование нанокompозитов на основе СВМПЭ и ММТ с эксфолиированной структурой.

Влияние толщины полимерных пленок нанокompозитов ППК+CdS на их электрические свойства и структуру поверхности

Иванова О.П.¹, Криничная Е.П.¹, Завьялов С.А.², Журавлева Т.С.¹

¹ИБХФ РАН, Москва

²НИЦ “Курчатовский институт”, Москва

Для полимерных пленок ППК+CdS с различными концентрациями наночастиц CdS (С~5–100 об. %) проведены исследования топографии

поверхности, оптических спектров поглощения, темновой и фотопроводимостей в зависимости от их толщины ($d \sim 0.02, 0.5$ и 1.0 мкм). Электрические измерения выполнены в температурном диапазоне 20-300К.

Температурная зависимость проводимости пленок поли-*пара*-ксилилена с добавками наночастиц Fe

Клименко И.В.¹, Завьялов С.А.², Журавлева Т.С.¹

¹ ИБХФ РАН, Москва

² НИЦ «Курчатовский институт», Москва

В работе представлены данные температурной зависимости (10-300К) темновой проводимости нанокompозитных пленок поли-*пара*-ксилилен-Fe с различной концентрацией наночастиц ($C_{Fe}=2-100$ об. %). Для пленок с $C_{Fe}=14$ об. % наблюдается появление металлического характера зависимости σ (Т) при $T=230$ К.

Новые катализаторы на основе диоксида церия для применения в реакциях с участием кислорода

Загайнов И.В.

ИМЕТ РАН, Москва

Интерес к катализаторам на основе диоксида церия связана с тем, что он обладает большим запасом кислородной емкости и высокой подвижностью кислорода, что обеспечит его высокую каталитическую активность. Был получен твердый раствор на основе CeO_2 ($Gd_xZr_yTi_zCe_{1-x-y-z}O_2$), который является перспективным катализатором.

Изотермическая кинетика обратимых фазовых превращений $\alpha \rightarrow \beta$ и $\beta \rightarrow \alpha$ в 1,1-диамино-2,2-динитроэтилене

Захаров В.В., Чуканов Н.В., Червонный А.Д., Возчикова С.А., Корсунский Б.Л.
ИПХФ РАН, г. Черногловка

С использованием методов дифференциальной изотермической и сканирующей калориметрии и инфракрасной спектрофотометрии изучена кинетика полиморфного превращения (ПП) $\alpha \rightarrow \beta$ и $\beta \rightarrow \alpha$ в 1,1-диамино-2,2-динитроэтилене. Установлены кинетические законы и константы скорости этих процессов.

Систематизация данных по наноматериалам: онтологический подход

Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А.
ОИВТ РАН, Москва

Для предметной области «Нанотехнологии и наноматериалы» предложено онтологическое моделирование как альтернатива технологии баз данных применительно к ч. Выявлены основные и вспомогательные классы, формирующие иерархию понятий, определяющих свойства наноразмерных объектов и основанных на их использовании приборов и технологий.

Солнечные элементы на основе наноуглерода

Елецкий А.В., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А.
ОИВТ РАН, Москва

В рамках проекта систематизации данных по наноматериалам для энергетики проанализировано использование наноуглерода в СЭ. Наиболее перспективно использование нанокompозитов, полимерной матрицы с добавкой углеродных нанотрубок и графена. Выявлены тенденции по выбору нанокompозитов и конфигурации устройств.

Исследование алкокси-NNO-азоксисоединений методом ЯМР ^{15}N на природном содержании изотопа

Зюзин И.Н., Черняк А.В.
ИПХФ РАН, Черноголовка

С целью создания базы данных по химическим сдвигам (ХС) алкоксиазокси-группы и выявления влияния на них природы заместителей методом ЯМР ^{15}N изучены 37 соединения разного строения. ХС фрагментов $\text{N}(\text{O})=$ находится в пределах $-77 \div -46$ м.д., а фрагментов $=\text{NOMe}$ $-12 \div 12$ м.д. и сильно зависят от природы заместителей.

Композиционные материалы на основе Fe и Co в ИК-пиролизованной полимерной матрице

Иванцов М.И.^{1,2}, Куликова М.В.², Земцов Л.М.², Чернавский П.А.¹
1. МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва
2. ИНХС РАН, Москва

Методом ИК-пиролиза синтезирован композиционный материал на основе металлов VIII группы (Fe, Co) и поливинилового спирта. Проведено исследование динамики образования нанокompозитов. Полученные системы изучены магнитометрическим методом *in situ*. Обнаружена каталитическая активность синтезированных композитов в процессе Фишера-Тропша.

Влияние размерного фактора на формирование фазы дититаната висмута со структурой пирохлора в порошках и упорядоченных 3D нанокompозитах

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

Разработан золь-гель метод направленного синтеза нанопорошка титаната висмута со структурой пирохлора, объемных керамических материалов на его основе и упорядоченных трехмерных нанокompозитов состава опаловая матрица (ОМ) – $\text{Bi}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$. Показано, что формированию фазы со структурой пирохлора способствует размерный фактор – величина избыточной поверхностной энергии.

Получение металлических и гетерометаллических наночастиц в опаловых матрицах при каталитическом дегидрировании изопропилового спирта в сверхкритических условиях

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

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

Влияние природы носителя на процесс активации железо-нанесенных катализаторов

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

В работе исследовалось влияние природы носителя на процесс активации Fe-нанесенных катализаторов в токе CO. Установлено, что основной компонент

до активации для углеродных носителей – магнетит, а для силикагелей – гематит. Показано, что в процессе активации образуется карбид Хэга, концентрация которого выше для углеродных носителей.

О влиянии крутизны отталкивательного потенциала взаимодействия атомных частиц на ход упругого дифференциального сечения рассеяния на малые углы

Калинин А.П.¹, Родионова И.П.²

1. ИПМех РАН, г. Москва
2. ИХФ РАН, г. Москва

Проводится рассмотрение связи поведения классического упругого дифференциального сечения рассеяния быстрых молекулярных частиц (~ 1 КэВ) для малых углов рассеяния ($\ll 1$ рад) с ходом чисто отталкивательного потенциала взаимодействия частиц.

Особенности микроскопического подхода к изучению свойств вещества

Калинин А.П.¹, Родионова И.П.², Родионов И.Д.²

1. ИПМех РАН, г. Москва
2. ИХФ РАН, г. Москва

Столкновения играют центральную роль почти во всех объяснениях строения структуры вещества при микроскопическом подходе. Целью настоящей работы является демонстрация возможностей микроскопического подхода к изучению вещества и фундаментальной роли понятия потенциала взаимодействия.

Функциональное описание межатомных короткодействующих потенциалов, определяемых по данным рассеяния молекулярных пучков

Калинин А.П.¹, Родионова И.П.², Родионов И.Д.²

1. ИПМех РАН, г. Москва
2. ИХФ РАН, г. Москва

Показано, что для описания экспериментальных угловых зависимостей рассеяния быстрых пучков на малые углы во многих случаях необходимо пользоваться особыми потенциальными функциями, например, с "плавающей" экспонентой что обеспечивает большую гибкость подгона расчета и измерений.

Возможности изучения процессов горения и взрыва с помощью дистанционного гиперспектрального зондирования

Виноградов А.Н.¹, Калинин А.П.², Родионов А.И.³, Родионов И.Д.⁴

1. МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет,
2. ИПМех РАН, г. Москва
3. ЗАО «Научно-технический центр «Реагент», г. Москва
4. ИХФ РАН, г. Москва

На основе созданного лабораторного гиперспектрометра, предназначенного для дистанционного зондирования отраженного, рассеянного и излученного света с расстояния 3 м., продемонстрирована возможность дистанционного изучения процессов горения и взрыва.

Отличительные свойства гидропероксидов этилена в его сополимерах с различными реакционноспособными группами

¹Калинина И.Г., ²Белов Г.П., ¹Гумаргалиева К.З.

- ¹ИХФ РАН, г. Москва
²ИПХФ, г. Черноголовка

В работе показано, что введение в полимер (как более, так и менее реакционноспособных звеньев приводит к повышению стабильности гидропероксида (к понижению эффективной константы скорости его распада - k_p). Это можно объяснить увеличением среднего расстояния между группами –ООН при введении в полимер инородных звеньев. Увеличение этого расстояния затрудняет цепной распад гидроперекисных групп.

Нанокompозиты на основе гидратированных оксидов олова и сурьмы: ИК спектры поглощения, строение

Ткачева Н.С., Надхина С.Е., Леонова Л.С., Левченко А.В., Карелин А.И.
ИПХФ РАН, Черноголовка

Ряд свежееосажденных воздушно – сухих образцов нанокompозитов $\text{SnO}_2 \cdot m\text{Sb}_2\text{O}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ (НК) был исследован методами термического анализа, рентгенофазового анализа и колебательной спектроскопии. Состав НК варьируется в пределах: $m = 0,2 - 0,9$ при $n = 1,8 - 3,2$. Данные ИКС показывают, что такие образцы имеют аналогичное гелям чистого гидроксида олова $\text{SnO}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ строение.

Протонная проводимость допированных мембран Nafion® при отрицательных температурах

*Каюмов Р.Р.¹, Шмыглева Л.В.¹, Сангинов Е.А.¹, Гизатуллин Б.И.²,
Добровольский Ю.А.¹*

¹ИПХФ РАН, г. Черноголовка

²КФУ, Институт Физики, кафедра молекулярной физики, Казань

В работе исследована протонная проводимость мембран Нафион, допированных кислотами HClO_4 , H_2SO_4 и H_3PO_4 различной концентрации, в широком диапазоне температур и количественно определено фазовое состояние воды в порах изучаемых мембран методом ядерной магнитной релаксации.

Перколяционная модель протонной проводимости каликсаренсульфокислот и фуллеренолов

Каюмов Р.Р., Шмыглева Л.В., Укше А.Е.
ИПХФ РАН, Черноголовка

Предложена общая модель протонного транспорта в неоднородной среде, содержащей водные кластеры, связанные с иммобильными протонгенирующими центрами, образующие планарную структуру (на примере каликсаренсульфокислот) и находящимися в твёрдом теле на значительном и случайном расстоянии друг от друга (на примере фуллеренолов).

Исследование электроноакцепторных центров в ходе каталитического дегидрохлорирования 1-хлорбутана на нанокристаллическом MgO

Бедило А.Ф.^{1,2}, Акимова Т.Н.³, Кенжсин Р.М.¹, Шуваракова Е.И.^{1,2}, Чесноков В.В.^{1,3}

1. ИК СО РАН, Новосибирск
2. НТИ МГУДТ, Новосибирск
3. НГТУ, Новосибирск

Исследованы изменения каталитической активности нанокристаллических аэрогелей MgO в реакции дегидрохлорирования 1-хлорбутана и изменения концентрации электроноакцепторных центров в ходе реакции. Обнаружено существование хороших корреляций между концентрацией электроноакцепторных центров и скоростью реакции.

Изучение активных центров (Pd-Rh)/Al₂O₃ катализаторов методами ЭПР-спектроскопии и фотолюминесценции

Кенжин Р.М., Володин А.М., Стояновский О.В., Ведягин А.А.
ИК СО РАН, Новосибирск

В настоящей работе с использованием методов фотолюминесценции и электронного парамагнитного резонанса исследована роль собственных основных (донорных) центров носителя в стабилизации как моно, так и биметаллических Pd- содержащих кластеров, проявляющих высокую активность в окислении СО

Адсорбция водорода на единичных наночастицах золота: эксперимент и моделирование

Курсанкин А.А., Колченко Н.Н., Гришин М.В.
ИХФ РАН, Москва

Методами сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии показано, что водород хемосорбируется на поверхности единичных наночастиц золота при комнатной температуре. Оценена нижняя граница энергии связи между водородом и золотом. Проведены квантово-химические расчеты методом DFT энергии связи между водородом и золотом для кластеров, содержащих 13, 20, 55 и 80 атомов золота.

Конверсия пиролизных смол в пористой насадке

Кислов В.М., Размыслов А.В., Глазов С.В., Салганская М.В.
ФГБУН ИПХФ РАН, Черноголовка

Экспериментально показана принципиальная возможность осуществления процесса конверсии смол, образующихся при термическом разложении твердых топлив, в свободный от смол горючий газ методом неполного сжигания в пористой насадке.

Расчеты поперечной проводимости нуклеотидных оснований ДНК подтверждают возможность их идентификации путем измерения тока через нуклеотиды при протягивании ДНК через нанопору

Клецов А.А.¹, Кацур А.В.¹, Михайлов А.И.¹, Браташов Д.Н.¹, Глуховской Е.Г.^{1,2}, Ortiz J.V.³

1. ОНИ наноструктур и биосистем, Саратов
2. СГУ, Саратов
3. Auburn University, Auburn, Alabama, USA

Проведенные расчеты поперечной проводимости нуклеотидных оснований ДНК подтверждают возможность их идентификации путем измерения тока через нуклеотиды при протягивании ДНК через нанопору

Управление целостностью нанокompозитных микроструктур на основе липидов, полимеров и неорганических наночастиц в электрическом поле

*Ермаков А.В.¹, Ким В.П.², Чумаков А.С.¹, Горбачев И.А.¹, Видяшева И.В.¹,
Петрова Н.В.¹, Горин Д.А.¹, Хомутов Г.Б.², Глуховской Е.Г.¹*

¹СГУ, Саратов

²МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

В работе представлены результаты исследования нанокompозитных микрочастиц «ядро-оболочка», содержащих в стенках оболочек металлические наночастицы, в электрических полях. Показано, что металлические наночастицы могут служить в качестве сенсibilизации таких структур к электрическому полю.

Влияние электрического поля на формирование ленгмюровских монослоев жирной кислоты

Чумаков А.С.¹, Ермаков А.В.¹, Ким В.П.², Горбачев И.А.¹, Глуховской Е.Г.¹

1. СГУ, Саратов

2. МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

В работе представлено изучение влияния нормально приложенного электрического поля на формирование ленгмюровских монослоев жирных кислот. Показано, что поле способно локально изменять кислотность субфазы и тем самым изменять структуру полученного монослоя.

Квантово-химическое моделирование молекулярного и электронного строения N-замещенных N-нитрозогидроксиламинов и их металлокомплексов

*Ковальчукова О.В.¹, Али Шейх Бостанабад¹, Рябов М.А.¹, Страинова С.Б.¹,
Зюзин И.Н.²*

1. Российский университет дружбы народов, Москва

2. Институт проблем химической физики, Москва

Методом DFT/B3LYP/def2-SV(P) изучены N-замещенные N-нитрозогидроксиламины и их металлокомплексы. Обсуждаются геометрические, спектральные характеристики и заряды на атомах. Работа

выполнена при поддержке гранта РФФИ № 13-03-00079. Все расчеты выполнены на суперкомпьютере «Чебышев» МГУ им. М.В. Ломоносова.

Фазовые переходы жидкость-жидкость и изотопический эффект в водных растворах лутидина по данным спектроскопии ЯМР высокого разрешения

Редькина К.С., Козлова С.Г., Габуда С.П.
ИНХ СО РАН, г. Новосибирск

В настоящем докладе методом ЯМР ^1H исследованы межмолекулярные взаимодействия в растворах лутидин-2,6/ D_2O и лутидин-2,6/ H_2O вблизи критических точек T_c ($28,35^\circ\text{C}$ и $33,87^\circ\text{C}$).

Исследование взаимодействия тиа- и оксакарбоцианиновых красителей с полимерами в растворах и в системах, содержащих магнитные наночастицы

*Колганова М.Н., Бычкова А.В., Сорокина О.Н., Пронкин П.Г.,
Розенфельд М.А., Татиколов А.С.*
ИБХФ РАН, Москва

Образование нековалентных комплексов тиа- и оксакарбоцианиновых красителей с синтетическими и биополимерами (ДНК, альбумин) было исследовано спектрально-флуоресцентными методами. Изучено взаимодействие красителей с полимерными компонентами (полистиролсульфоуксусная кислота, альбумин) в составе наносистем, содержащих магнитные наночастицы.

Проводимость хиральных нанотрубок в приближении Дирака

Колесников Д.В., Лебедев Н.Г., Иванченко Г.С.
ВолГУ, Волгоград

В данной работе производится численный расчет фононных спектров и продольной проводимости хиральных углеродных нанотрубок. Фононные спектры рассчитывались методами квантовой механики в рамках приближения Дирака в окрестности К-точки. Проводимость углеродных наночастиц вычислялась с использованием двухзонной модели Хаббарда.

Преобразование смол пиролиза древесины в горючий газ

*Колесникова Ю.Ю., Глазов С.В., Кислов В.М., Размыслов А.В.,
Салганский Е.А., Салганская М.В.*
ИПХФ РАН, г. Черноголовка

Приведены результаты экспериментов по конверсии смол пиролиза древесины двумя различными способами. Показана принципиальная возможность конверсии древесных смол в горючий газ, практически не содержащий смолу.

Взаимодействие тонкопленочных структур сплава палладия В1 с водородом

Вяткин А.Ф., Волков В.Т., Колчина А.С.
ИПТМ РАН, г.Черноголовка

Было проведено исследование кинетики взаимодействия водорода с тонкими (25 и 50 нм) пленками сплава на основе палладия, изготовленных методом ВЧ-диодного осаждения, при комнатной температуре с использованием метода измерения электрического сопротивления этих пленок.

Исследование пористых структур как подложек для сверхтонких палладиевых мембран

Вяткин А.Ф., Волков В.Т., Касумов Ю.А., Колчина А.С.
ИПТМ РАН, г.Черноголовка

Были разработаны требования для градиентно-пористых структур, соблюдение которых позволило бы создать подложки для сверхтонких водородосепарирующих мембран на основе палладия или его сплавов, обеспечивающие механическую прочность и сверхвысокую селективность этих фильтрующих слоев.

Физико-химические характеристики крови при развитии гемолитической анемии и введении наночастиц железа

*Коноваленко Д.П.¹, Хомяков А.А.¹, Богословская О.А.², Рахметова А.А.²,
Ольховская И.П.², Глуценко Н.Н.²*

1. РУДН, Россия, Москва.

2. ФГБУ ИНЭПХФ РАН им.В.Л.Тальрозе, Россия, Москва.

Изучено влияние наночастиц железа на развитие гемолитической анемии, индуцированной фенилгидразином г/х. Показано, что введение наночастиц железа за 3-е суток до введения фенилгидразина г/х снижает тяжесть протекания гемолитической анемии: увеличивается содержания гемоглобина, оксигемоглобина и количества эритроцитов в крови.

Изучение активности, селективности и эволюции катализатора парового реформинга метана, устойчивого к H₂S

*Константинов Г.И., Курдюмов С.С., Максимов Ю.В., Мурзин В.Ю.,
Цодиков М.В.
ИНХС РАН, Москва*

В работе представлены результаты изучения активности и селективности никелевого катализатора парового реформинга метана, полученного на основе смешанных оксидов, выделенных из слоистого вермикулита. Определены серо- и коксоустойчивость катализатора.

Новый метод определения объема активации и объема реакции при нулевом избыточном гидростатическом давлении

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

Нами обнаружена надежная зависимость ($R^2=0.99$, $n=32$), которая позволяет предсказывать значение объема активации и объема реакции при давлении $P=1$ бар. Для этого достаточно определить значения лишь двух констант скоростей или двух констант равновесия при давлениях $P=1$ бар и $P=1000$ бар.

4-фенил-1,2,4-триазолин-3,5-дион в еновых реакциях с циклогексеном, 1-гексеном и 2,3-диметил-2-бутеном

*Корнилов Д.А.¹, Киселёв В.Д.¹, Кашаева Е.А.¹, Потапова Л.Н.¹,
Коновалов А.И.²*

1. К(П)ФУ, Казань
2. ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань

Нами были изучены еновые реакции 4-фенил-1,2,4-триазолин-3,5-диона с циклогексеном, гексеном-1 и 2,3-диметилбутеном-2. Для данных реакций были впервые получены значения энтальпии, энтропии и объема активации, объема реакции и энтальпии реакции.

Применение методов оптического манипулирования и фемтосекундной лазерной нанохирургии в доимплантационном развитии млекопитающих.

*Костров А.Н., Залесский А.Д., Осыченко А.А., Захарченко Е.О.,
Астафьев А.А., Шахбазян А.К., Надточено В.А.
ИХФ РАН, Москва*

Манипуляции с ранними эмбрионами млекопитающих – один из наиболее существенных подходов изучения их доимплантационного развития. В нашей лаборатории методом фемтосекундной лазерной микрохирургии были проведены эксперименты по слиянию двухклеточных эмбрионов мыши с целью получения тетраплоидных бластоцист.

Влияние на электрофизические свойства фторсодержащих полимеров физико-химических изменений в их поверхности при напылении на них различных металлов.

*Кочервинский В.В.¹, Чубунова Е.В.², Лебединский Ю.Ю.², Павлов А.С.¹
¹ОАО НИФХИ, Москва
²НИЯУ МИФИ, Москва*

Методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии обнаружено образование новых функциональных групп в поверхности фторсодержащих сегнетоэлектрических полимеров при напылении Al. Частичная блокировка электродов сказывается на высоковольтной проводимости, которая в случае электродов из Au оказывается выше.

Влияние спутного потока газа на закономерности горения порошковых и гранулированных смесей Ni +Al

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

В данной работе проводилось исследование закономерностей горения как порошковых, так и гранулированных смесей Ti+0,5C при различном содержании влаги в исходной смеси как при продуве образца аргоном (спутная фильтрация), так и без продува.

Исследование влияния механической активации на горение прессованных образцов и образцов насыпной плотности из смеси Ni-Al

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

В данной работе проводилось исследование закономерностей горения как прессованных образцов, так и образцов насыпной плотности из смеси Ni-Al, подвергнутой механической активации. Показано, что механическая активации исходной смеси приводит к смене механизма передачи тепла в волне горения.

Исследование фотофизических свойств органических красителей и их супрамолекулярных комплексов в силикатных гелях.

Пилипенко М.С., Иванов Д.А., Молчанов С.П., Кошкин А.В., Петров Н.Х.
ЦФ РАН, Москва

Исследованы фотофизические свойства флуоресцентных гелей на основе тетраэтоксисилана, содержащие флуоресцентные органические красители или комплексы органических красителей с кукурбит[7]урилом. Показана возможность использования материалов в качестве сенсоров на летучие органические соединения.

***In situ* исследование методом порошковой рентгеновской дифракции влияния ионов Al^{3+} на восстановление оксида кобальта**

*Коэмец Е.Г.^{1,2}, Черепанова С.В.^{1,2,3}, Булавченко О.А.^{1,2}, Селютин А.Г.^{1,2,3},
Сименцова И.И.¹*

1. ИК СО РАН, Новосибирск
2. НГУ, Новосибирск
3. НГУ, НОЦ ЭК, Новосибирск

В настоящей работе методом *in situ* порошковой рентгеновской дифракции было исследовано влияние ионов Al^{3+} на процесс восстановления кобальтовых катализаторов, моделирующих промышленные $Co_3O_4/\gamma-Al_2O_3$. Было обнаружено замедление восстановления CoO в металлический кобальт, зависящее от количества алюминия в исходном $Co_{3-x}Al_xO_4$.

Импедансное исследование сополимера метилового и этилового эфиров метакриловой кислоты с различными пропорциями добавления углеродных нанотрубок

Крутойров А.А., Запороцкова И.В.
ВолГУ, Волгоград

В работе к образцам полимеров применялась разность потенциалов в диапазоне от -1 V до 20 V, с частотами 200 kHz, 300 kHz и 400 kHz. Разность потенциалов создавалась с помощью двух металлических электродов, между которыми зажимался исследуемый образец. Получены значения импеданса для образцов с различным содержанием УНТ

PbF: к поиску вариаций фундаментальных постоянных

Кудашов А.Д.^{1,2}, Скрипников Л.В.^{1,2}, Петров А.Н.^{1,2}, Титов А.В.^{1,2}

1. СПбГУ, Санкт-Петербург

2. ПИЯФ, Гатчина

Были изучены спектроскопические характеристики основного электронного состояния PbF, с целью найти оптимальное электронно-колебательное состояние для экспериментального поиска вариации фундаментальных постоянных.

Взаимосвязь механизмов фото- и газочувствительности композитных нанопленок на основе сложных оксидов олова и титана.

Куприянов М.Ю., Завьялов С.А.
НИФХИ им. Л.Я.Карпова, Москва

Изучены особенности структуры и физико-химических свойств пленочных материалов на основе смешанных оксидов олова и титана. На основании данных по фото- и газочувствительности образцов, а также особенностей их микроструктуры, предложен механизм проводимости пленок и установлена его связь с возникновением сигнала сенсорного отклика. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 12-03-00286.

Взаимодействие молекулярного кислорода с нитрозильными комплексами мезо-моно-пиридил-три-арил-порфиринов кобальта(II)

Куртикян Т.С., Габриелян Н.А., Казарян Р.К.
ЦИСМ НТЦОФХ НАН РА, Ереван, Армения

Исследовано взаимодействие O_2 с пяти- и шести-координационными нитрозильными комплексами мезо-моно-пиридил-содержащих порфиринов $Co(II)$ в их сублимированных слоях. Показано, что имеет место реакция диоксигенации монооксида азота, за которую ответственны 6-координационные нитрозильные комплексы с лабильно-связанным NO.

Влияние перекристаллизации воды на её диэлектрическую проницаемость, вязкость и состояние Н-связей

Лаврик Н.Л.¹, Горностаева Е.В.²
1 ИХКГ СОРАН, Новосибирск
2 НГУ, Новосибирск

Установлено, что диэлектрические проницаемости различных типов исходных вод после перекристаллизации имеют разнонаправленные изменения. В пределах экспериментальной погрешности не выявлено различий вязкостей и распределений Н-связей между образцами талой и контрольной (исходной) дистиллированной и деионизованной воды.

Квантовохимическое исследование механизма начальной стадии стереоселективной сборки 2,3,4-триметил-7-метилден-1,5-ди(тиофен-2-ил)-6,8-диоксабицикло[3.2.1] октана

Ларионова Е.Ю.¹, Витковская Н.М.², Трофимов Б.А.³

1. Восточно-Сибирский институт МВД России, Иркутск.
2. Иркутский государственный университет, Иркутск.
3. Иркутский институт химии СО РАН, Иркутск.

В рамках метода квантовой химии MP2/6-311++G**//B3LYP/6-31G* с учетом сольватационных эффектов в континуальной модели РСМ изучена первая стадия стереоселективной сборки 2,3,4-триметил-7-метилден-1,5-ди(тиофен-2-ил)-6,8-диоксабицикло-[3.2.1]октана из аниона этинилтиофена и молекулы ацетилен. Рассмотрено геометрическое строение реагентов и продуктов. Проведена оценка активационного барьера и теплового эффекта первой стадии реакции.

Квантовохимическое исследование присоединения воды и сероводорода к ацетилену в суперосновной среде KOH/DMSO

*Витковская Н.М.¹, Скитневская А.Д.¹, Ларионова Е.Ю.¹, Барбаев И.Г.¹,
Трофимов Б.А.²*

1. ФГБОУ ВПО «ИГУ», Иркутск
2. ИРИХ СО РАН, Иркутск

Получены поверхности потенциальной энергии (ППЭ) нуклеофильного присоединения молекул H₂X (X=O, S) к ацетилену в рамках метода MP2/6-311++G**//B3LYP/6-31G*, описывающие первые стадии реакций гидратационной тримеризации ацетилен и синтез дивинилсульфида. Показано, что нуклеофилы – вода и сероводород в отличие от метанола и метантиола образуют активные ионные интермедиаты способные к дальнейшим взаимодействиям с ацетиленом.

Магнитные эффекты в бактериальных клетках *E.coli*

Летута У.Г.^{1,2}, Авдеева Е.И.¹, Бердинский В.Л.^{1,2}

1. ОГУ, Оренбург
2. ИКВС УрО РАН, Оренбург

Доказано совместное влияние слабых магнитных полей и ядерного спина магнитного изотопа ^{25}Mg на жизнедеятельность бактериальных клеток *E.coli*. Теоретические расчёты подтверждают экспериментальные данные.

Химический «anti-Zeno» эффект – новый механизм спинового катализа в радикальных триадах ($\dot{R}_1, \dot{R}_2, \dot{R}_3$)

Летута А.С., Бердинский В.Л.
ОГУ, Оренбург

Показано, что в радикальных триадах ($\dot{R}_1, \dot{R}_2, \dot{R}_3$) спин - селективная рекомбинация $\dot{R}_2 + \dot{R}_3$ ускоряет спиновую эволюцию радикальных пар (\dot{R}_1, \dot{R}_2) и таким образом катализирует реакцию $\dot{R}_1 + \dot{R}_2$. Химический «anti-Zeno» эффект – это ускорение спиновой эволюции в радикальных парах (\dot{R}_1, \dot{R}_2) из-за спин - селективной рекомбинация $\dot{R}_2 + \dot{R}_3$.

Фотохимические и люминесцентные свойства замещенных 3-стирилбензо[f]хинолинов

Ли В.М., Будыка М.Ф., Гавришова Т.Н., Поташова Н.И., Карпов О.Н.
ИПХФ РАН, г. Черноголовка

Показано, что 3-метокси- и 4-метоксикарбонилпроизводные 3SBQ обладают сильной флуоресценцией ($\phi_{\text{fl}} = 0.74-0.67$) и вступают в реакции фотоизомеризации и фотоциклизации с образованием С-Н связи, в то время как 4-метоксизамещенный 3SBQ обладает слабой флуоресценцией ($\phi_{\text{fl}} = 0.043$) и подвергается исключительно фотоизомеризации.

Исследование спектральных свойств сольватохромных красителей в комплексах с циклодекстринами и в гелях

Лобова Н.А., Кошкин А.В., Пилипенко М.С., Иванов Д.А., Петров Н.Х.
Центр фотохимии РАН, Москва

Исследованы спектральные свойства сольватохромных красителей в составе комплексов с производными циклодекстринов, а также поведение красителей в гелях в отсутствие и в присутствии кавитандов.

Водопоглощающие свойства сополимера диаллилдиметиламмоний хлорида и акриламида

Лукиша Р.С., Иванова Е.А., Рашидова С.Т., Борисов И.М.
БГПУ имени М. Акмуллы, Уфа

Подобраны условия синтеза гидрогеля - сополимера диаллилдиметиламмоний хлорида (ДАДМАХ) $(\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2)_2\text{N}^+(\text{CH}_3)_2\text{Cl}^-$ и акриламида (АА) $\text{CH}_2=\text{CHC}(\text{O})\text{NH}_2$ с заданной надмолекулярной структурой, обеспечивающей набухаемость гидрогеля более 1000 г $\text{H}_2\text{O}/$ 1 г геля. Показано, что водопоглощающие свойства гидрогеля зависят от мольного соотношения сомономеров, скорости инициирования и размера образующихся макромолекул.

Кинетика распада персульфата аммония

Лукиша Р.С., Иркабаева Э.А., Рашидова С.Т., Борисов И.М.
БГПУ имени М. Акмуллы, Уфа, Россия

Впервые показано, что в водной среде разложение персульфата аммония лимитируется распадом персульфат-ионов. Экспериментально определяемая константа скорости расщепления персульфата аммония связана с константой скорости распада персульфат-ионов и их активностью и поэтому зависит от ионной силы раствора.

Определение констант ионизации амфолитов методом безбуферной спектрофотометрии

Лысова С.С., Старикова Т.А., Зевацкий Ю.Э.
СПГУТД, г. Санкт-Петербург

Предложен новый подход к определению значений термодинамических констант ионизации цвиттер-ионных амфолитов в водных и водно-органических средах, не требующего определения кислотности среды в комплексе с численными экстраполяционными методами интерпретации данных спектрофотометрических измерений.

Нитрование имидазола и его производных

Ляпунова М.В., Белых С.И., Мальков В.С.
ЛКИ ТГУ, Томск

Работа посвящена процессам нитрования имидазола и его производных. Выведены закономерности влияния заместителей на протекание реакции

нитрования, подобраны нитрующие агенты и оптимальные условия. На основе полученных нитропроизводных синтезированы противогрибковые препараты диметридазол и тинидазол.

Модификация углеродных сорбентов путем ступенчатого мягкого окисления

Гатауллина А.Р.¹, Крейкер А.А.^{1,2}, Магаев О.В.^{1,2}

1. ТГУ, г. Томск 2. ООО «Глиоксаль-Т», г. Томск

В ходе работы определены оптимальные условия термоактивации сорбента «Сибунит», позволяющие значительно увеличить сорбционную емкость и удельную поверхность углеродного сорбента, по сравнению с известными углеродными аналогами, применяемыми в медицине. Работа выполнена с привлечением оборудования ЦКП СКИ ТГУ.

Изучение возможности радиационной стерилизации наносомальной формы доксорубина на основе полилактида RESOMER 502Н

*Максименко О.О.¹, Шипуло Е.В.¹, Малиновская Ю.А.¹, Лазарева Е.П.¹, Бутько А.П.¹, Молин А.А.², Горшкова М.Ю.³, Пучков И.А.⁴, Балабаньян В.Ю.⁴,
Гельперина С.Э.¹*

¹ ООО «НПК «Наносистема», Москва

² ООО «Центр «Атоммед», Москва

³ НИИПМ, Москва

⁴ ООО Технология лекарств, Москва

Изучено влияние ионизирующего излучения на стабильность лекарственной формы доксорубина на основе PLGA. Показана принципиальная возможность и найдены оптимальные условия радиационной стерилизации для данной лекарственной формы.

Влияние природы носителя на состояние нанесенного хрома и активность в реакции дегидрирования парафиновых углеводородов

Бугрова Т.А., Литвякова Н.Н., Магаев О.В., Крейкер А.А., Мамонтов Г.В.
ТГУ, г. Томск

Показано, что комбинирование свойств нескольких оксидных носителей в сложных носителях позволяет управлять состоянием и активностью нанесенного хрома, что является основой получения высокоактивных хромсодержащих катализаторов дегидрирования парафиновых углеводородов. Работа выполнена при поддержке ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-

технологического комплекса России на 2014-2020 годы» (контракт № 14.577.21.0017).

Образование электронно-возбужденных интермедиатов ксенона и кислорода при твердофазном разложении дифторида ксенона на поверхности силикагеля.

Мамыкин А.В., Остахов С.С., Масыгутова Г.А.
ИОХ УНЦ РАН, Уфа.

Исследована хемилюминесценция (ХЛ), возникающая при твердофазном разложении дифторида ксенона на поверхности силипора. Установлено, что в роли эмиттеров ХЛ в видимой и инфракрасной областях спектра выступают Xe^* , Xe^{+*} , $^1\text{O}_2$. Спектрофотометрически обнаружено образование озона в газообразных продуктах его восстановления.

Влияние пропана на физико-химические свойства оксида алюминия.

Маркова Е.Б.^{1,2}, Красильникова О.К.¹, Серов Ю.М.²
¹ИФХЭ РАН, Москва.
²РУДН, Москва.

В данной работе описываются структурные изменения нановолокнистого аэрогеля оксида алюминия под действием атмосферы пропана, которые повышают каталитическую и адсорбционную активность.

Твердофазный механохимический синтез комплексов циркония, ванадия и хрома с О,О-лигандами и исследование их каталитических свойств в реакциях полимеризации и сополимеризации этилена.

Махаев В.Д.¹, Петрова Л.А.¹, Бравая Н.М.¹, Мухина Е.В.¹, Панин А.Н.¹, Гагиева С.Ч.², Тускаев В.А.²
1. ИПХФ РАН, Черноголовка
2. Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Исследовано влияние условий механического воздействия на свойства систем «соль О,О-лиганда – MCl_3 (ZrCl_4)» ($\text{M} = \text{V}, \text{Cr}$), изучены каталитические свойства полученных продуктов в полимеризации этилена. Выявлены наиболее активные системы, а также системы, позволяющие получать ПЭ высокой степени кристалличности.

Сравнительный анализ самоорганизующихся систем на основе полиметакрилатов и хиральных дипептидов с объемными заместителями в твердом состоянии и в растворе

Мещанкина М.Ю.¹, Бакиров А.В.¹, Щербина М.А.¹, Перчек В.², Чвалун С.Н.³

1. ИСПИ РАН, г. Москва

2. University of Pennsylvania, Philadelphia, USA

3. НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва

Работа содержит сравнительный анализ формы и структуры супрамолекулярных агрегатов, формирующихся в результате самосборки соединений на основе галловой кислоты в растворе и в твердом состоянии. Исследовано фазовое поведение дипептидов с регулярной дендритной структурой, а также полиметакрилатов с различными степенями полимеризации и с объемными боковыми заместителями на основе производных галловой кислоты.

Моделирование механических свойств цис–изопренового каучука и композиций на его основе

Акименко С.С., Митряева Н.С., Мышлявцев А.В.

ОмГТУ, г.Омск.

В данной работе построена простейшая модель цис-изопренового каучука. Рассчитаны его механические свойства. Разработан алгоритм вулканизации. Вычислен модуль Юнга для вулканизата.

Предельные условия распространения газовой детонации по каналам постоянного сечения, в свободном пространстве и переходе детонации из трубы в объём

Михалкин В.Н.^{1,2}, Хомик С.В.¹

1. ИХФ РАН, Москва

2. АГПС МЧС РФ, Москва

Проведены расчеты предельных параметров распространения детонации многокомпонентных газовых смесей по каналам постоянного сечения, в свободном пространстве и переходе из трубы в объём. Показано, что предельные параметры распространения детонации в многокомпонентных горючих газовых смесях можно рассчитывать по формуле аналогичной формуле Ле Шателье для концентрационных пределов.

Корреляция между электропроводностью и содержанием кислотных остатков в порошках полианилина

Мокрушин А.Д.¹, Егоров Е.В.¹, Богатыренко В.Р.²

1. ИПТМ РАН, Черноголовка
2. ИПХФ РАН, Черноголовка

Проведены измерения удельной электропроводности и атомных отношений Cl/N для ряда порошкообразных образцов полианилина, подвергнутых дополнительной обработке в водных растворах соляной кислоты различной молярности. При некоторых допущениях имеет место корреляция между значениями электропроводности и отношений Cl/N .

Позитронная микродефектоскопия процесса спекания керамики из нитрида бора

*Бардышев И.И., Гольданский А.В., Котенев А.В., Мокрушин А.Д.,
Цивадзе А.Ю.
ИФХЭ РАН*

Методом позитрон-электронной аннигиляции исследовались образцы керамики из нитрида бора, отжигавшиеся в широком интервале температур. Анализ аннигиляционных характеристик позволил сделать выводы о поведении вакансионных микродефектов в нитриде бора в зависимости от температуры отжига и впервые оценить значение коэффициента диффузии позитронов в BN.

Ингибиторные свойства графита в полипропилен-графитовых нанокompозитах

*Масталыгина Е.Е.^{1,3}, Монахова Т.В.¹, Недорезова П.М.², Польщиков С.В.²,
Попов А.А.¹, Марголин А.Л.¹*

1. ИБХФ РАН, г. Москва
2. ИХФ РАН, г. Москва
3. ФГБОУ ВПО «РЭУ им. Г.В. Плеханова», г. Москва

Экспериментально показано, что наночастицы графита вступают в реакцию с пероксильными радикалами ПП. Из данных о константах скорости реакции радикалов с графитом и на основе модели эстафетно-сегментальной диффузии радикалов ПП были оценены размеры частиц графита (4 нм), которые согласуются с оценкой по удельной поверхности частиц (5 нм).

Придание пластичности хрупким гетерогенным полимерным системам путем двухосной ориентации в металлической матрице.

Монахова К.З., Кечекьян А.С., Озерин А.Н.
ИСПМ им. Ениколопова при РАН, Москва

Обнаружено, что при двухосной ориентации хрупких полимерных пленок (с высокой степенью кристалличности или наполненных до хрупкости) путем сжатия их между дисками, они, раздавливаясь совместно с дисками, в ряде случаев приобретают пластичность.

Обмен “гость-хозяин” в металлоорганическом полимере $[Zn_2(bdc)(S-lac)(dmf)] \cdot dmf$

*Галлямов М.Р., Пищур Д.П., Дыбцев Д.Н., Козлова С.Г., Мороз Н.К.,
Федин В.П.*
ИНХ СО РАН, Новосибирск

С использованием методов ЯМР и сканирующей калориметрии обнаружен молекулярный обмен между координированными и гостевыми молекулами dmf (*N,N*-диметилформамид) в гомохиральном каркасе $[Zn_2(bdc)(S-lac)(dmf)] \cdot dmf$ (bdc = 1,4-бензодикарбоксилат; *S-lac* = *L*-(-)-лактат). Оценена энергия активации обменного процесса (37 кДж/моль).

Превращение синтез-газа в диметилловый эфир на смешанных катализаторах

Мусич П.Г.¹, Курина Л.Н.¹, Восмерилов А.В.²

1. ТГУ, г. Томск
2. ИХН СО РАН, г. Томск

Показано, что послойная загрузка с промежуточным средним слоем катализаторов синтеза метанола и его дегидратации позволяет увеличить степень превращения образовавшегося в ходе катализа метанола в диметилловый эфир. Работа выполнена при поддержке РФФИ № 13-08-98129 р_сибирь_a, с привлечением оборудования ЦКП СКИ ТГУ

Влияние внешних полей на распространение предельно коротких оптических импульсов в брэгговской среде с углеродными нанотрубками

Белоненко М.Б.¹, Невзорова Ю.В.²

1. Волгоградский институт бизнеса, Волгоград
2. ВолГУ, Волгоград

На основании решения бесстолкновительного уравнения Больцмана для электронов зоны проводимости полупроводниковых углеродных нанотрубок получено эффективное уравнение для динамики предельно коротких оптических импульсов, в случае, когда среда в которую помещены углеродные нанотрубки имеет пространственно модулированный показатель преломления. Получен эффект восстановления формы импульса в присутствии электрического поля. Проведен анализ в зависимости от параметров задачи.

Влияние дисперсного состава алюминия на теплопроводящие и диэлектрические свойства металл-полимерных композиционных материалов

Нежный П.А., Кудинова О.И., Гринев В.Г., Крашенинников В.Г., Рывкина Н.Г., Чмутин И.А., Березкина Н.Г., Новокшионова Л.А.
ИХФ РАН, г. Москва, Россия

Применение сочетания методов полимеризационного наполнения и мультидисперсных смесей наполнителя позволили синтезировать новый высоконаполненный композиционный материал на основе СВМПЭ и частиц алюминия нано- и микронного размеров. Разработанный в ИХФ РАН КМ обладает диэлектрическими, пластическими и повышенными теплопроводящими свойствами.

Новые подходы к синтезу сажи с высоким содержанием высших фуллеренов

Некрасов В.М.^{1,2}, Кареев И.Е.¹, Бубнов В.П.¹
¹ИПХФ РАН, Черноголовка
²ФФФХИ МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Исследовано влияние добавок карбоната калия от 1 до 12 вес.% и изменение давления гелия на содержание в саже высших фуллеренов C₇₆, C₇₈, C₈₀, C₈₂, C₈₄, C₈₆ и др. Найдены оптимальные условия испарения композитных графитовых электродов, позволяющие получать сажу с высоким содержанием высших фуллеренов до 11.4 вес.% в экстракте.

Гольмиевый эндодральный металлофуллерид K(18-crown-6)[Ho@C₈₂]

Некрасов В.М.^{1,2}, Кареев И.Е.¹, Бубнов В.П.¹
¹ИПХФ РАН, Черноголовка
²ФФФХИ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

Окислительно-восстановительным взаимодействием эндоэдрального металлофуллерена $\text{Ho}@C_{82}$ с донором электронов перхлоротрифенилметидом калия $\text{K}(18\text{-crown-6})[\text{C}(\text{C}_6\text{Cl}_5)_3]$ впервые синтезирован и охарактеризован методами спектрофотометрии, масс-спектрометрии эндоэдральный металлофуллерид $\text{K}(18\text{-crown-6})[\text{Ho}@C_{82}]$.

Радиолиз эскулина и эскулетина в спиртовых растворах

*Николаева В.В., Антропова И.Г., Пхъйо Мьинт У, Полякова К.И.
РХТУ им. Д.И. Менделеева, г. Москва.*

Исследовано влияние гликозидных фрагментов и ионов металлов на антирадикальную активность эскулина и эскулетина. Показано снижение активности в присутствии ионов цинка и при наличии гликозидного фрагмента в молекуле.

Генезис фазового состава Mn-Ga и Mn-Fe оксидных систем при температурном воздействии

*Никулина О.С.^{1,2}, Булавченко О.А.^{1,2}, Яценко Д.А.^{1,2}, Цыбуля С.В.^{1,2},
Зенковец Г.А.¹*

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

Методами рентгеновской дифракции и электронной микроскопии изучены структурные особенности и фазовый состав Mn-Ga- и Mn-Fe-оксидов в зависимости от условий приготовления и содержания марганца. Показано, что температурное воздействие в средах с различным парциальным давлением кислорода позволяет варьировать фазовый состав и структуру.

Первый лиганд фосфитной природы на основе ((4R,5S)-5-(гидроксиметил)-2,2-диметил-1,3-диоксалан-4-ил)дифенилметанола

*Новиков И.М., Жеглов С.В., Бочелюк М.С., Луговский В.В.
РГУ имени С.А. Есенина, г. Рязань*

В литературе отсутствуют примеры фосфитных производных ((4R,5S)-5-(гидроксиметил)-2,2-диметил-1,3-диоксалан-4-ил)дифенилметанола (**1**). Этот 1,4-диол удобно получается из монометилового эфира доступной (R,R)-винной кислоты. Взаимодействием **1** с PCl_3 и, далее, с пирролидином нами получен амидофосфит **2**, имеющий стереогенный атом фосфора.

Определение констант скоростей реакций с участием ридберговских состояний атомов и молекул. диффузионный подход

Озеров Г.К., Голубков Г.В., Малышев Н.С., Голубков М.Г.
ИХФ РАН, Москва

В настоящей работе разработан теоретический подход, который позволяет, исходя из уравнения эволюции матрицы плотности системы, получить уравнения относительно плотности состояний ридберговского электрона в представлении энергии. Эта система уравнений сводится к уравнению диффузии для заселенностей ридберговских состояний.

Электронное строение полинитрометанов

Орлов Ю.Д.¹, Орлов М.Ю.¹, Туровцев В.В.^{1,2}

¹ ТвГУ, Тверь

² ТГМА, Тверь

Изучено электронное строение молекул и радикалов CH_3NO_2 , $\text{CH}_2(\text{NO}_2)_2$, $\text{CH}(\text{NO}_2)_3$, $\text{C}(\text{NO}_2)_4$, CH_2NO_2 , $\text{CH}(\text{NO}_2)_2$, $\text{C}(\text{NO}_2)_3$. В рамках QTAIM найдены заряды, полная электронная энергия, объём и спиновая плотность атомных групп $R = \text{CH}_3$, CH_2 , CH , C и NO_2 . Показано, что формально одинаковые группы характеризуются неодинаковыми электронными параметрами и обладают ограниченной переносимостью при феноменологическом моделировании свойств веществ.

Парамагнитные комплексы в каталитических системах метатезиса олефинов на основе моно-, би- и гексаядерных соединений рения по данным спектроскопии ЭПР

Исмаилов Э.Г.¹, Аббасов Я.А.¹, Османова С.Н.², Османов Н.С.²

¹Институт нефтехимических процессов НАН Азербайджана, Баку

²Институт химических проблем НАН Азербайджана, Баку

С использованием метода ЭПР спектроскопии идентифицированы комплексы рения с отличным от нуля электронным спином в каталитических системах метатезиса олефинов на основе моно-, би- и гексаядерных соединений рения различной валентности, исследованы их реакции с C2-C6 олефинами, их смесями C2+C4, C2+C6.

Фотофизика и фотохимия кристаллического 5-фторурацила

Остахов С.С., Султанбаев М.В., Хурсан С.Л.
ИОХ УНЦ РАН, Уфа.

Обнаружен фотоиндуцированный перенос протона и электрона в кристаллических образцах 5-фторурацила, приводящий к образованию его гидроксо-форм и радикалов.

Механизм гидросилилирования бензальдегида диметилсиланом на силиамидном комплексе $(ArN=)_2[{}^tBu(Me_2HSi-)N]MoH$

Охапкин А.И., Игнатов С.К., Разуваев А.Г.
ННГУ, г. Нижний Новгород

При квантовохимическом исследовании (теория функционала плотности) механизма гидросилилирования бензальдегида диметилсиланом на силиамидном комплексе молибдена обнаружен каталитический цикл, состоящий из стадии внедрения альдегида и метатезиса образовавшегося в результате этого интермедиата.

Квантово-химическое исследование адсорбции кислорода на чистых и легированных кластерах золота

Охапкин А.И., Игнатов С.К., Логинова А.С., Гаджиев О.Б., Разуваев А.Г.
ННГУ, г. Нижний Новгород

В результате квантово-химического расчёта (теория функционала плотности) были определены энергии и термодинамические параметры молекулярной и диссоциативной адсорбции кислорода в системе $Au_{13}O_2$ и $Au_xAg_{13-x}O_2$ в отсутствие и в присутствии O , C_2H_4 и CO .

Влияние состава Pd_xZn_{100-x} наночастиц на активность и селективность в реакции гидрирования 2-метил-3-бутин-2-ола

Охлопкова Л.Б.¹, Керженцев М.А.¹, Исмагилов З.Р.^{1,2}
1. ИК СО РАН, Новосибирск
2. ИУХМ СО РАН, Кемерово

Проведено сравнительное исследование каталитических свойств образцов Pd_xZn_{100-x}/TiO_2 в реакции селективного гидрирования 2-метил-3-бутин-2-ола, приготовленных из наночастиц различного состава. Показано, то эффект

состава наночастиц на селективность по МБЕ не зависит от температуры восстановления в интервале от 523 до 773 К. Наибольшую селективность по алкену проявляли образцы Pd₈₀Zn₂₀/TiO₂.

Оксиды железа и кобальта, диспергированные на активированных углях: размерный эффект.

Панкина Г.В., Казак В.О., Лунин В.В.

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

Катализаторы Fe- и Co/Сагт. синтезированы и изучены в реакции восстановления водородом в заданных условиях (β - скорость нагрева, T - температура, V – скорость потока газа) с помощью манитометрического метода *in situ*. Получены физические параметры (N_c , σ_s , σ_r) для построения распределения частиц по размерам (РЧП). Оценены средние размеры частиц металлов ($d_{ср.}$). Сделаны выводы по прогнозированию поведения изученных систем в СФТ.

Исследование эффекта Зеемана в молекуле ThO для поиска электрического дипольного момента электрона.

Петров А.Н.^{1,2}, Скрипников Л.В.^{1,2}, Титов А.В.^{1,2}

1. СПбГУ, Санкт-Петербург
2. ФГБУ «ПИАФ» НИЦ КИ, Гатчина

Рассмотрены g-факторы для Ω -дублетов J=1,2 вращательных уровней ThO во внешнем электрическом. Показано, что измерения электрического дипольного момента электрона на J=2 вращательных уровнях является еще более устойчивым к проявлению ложных эффектов чем J=1.

Механохимический синтез тетракис(пентафторфенил)боратов трифенилметилия и трифенилциклопропенилия и тестирование их каталитических свойств в реакциях полимеризации этилена.

Петрова Л.А., Махаев В.Д., Бравая Н.М., Файнгольд Е.Е., Галуллин А.Н.
ИПХФ РАН, Черноголовка

Разработаны методы твердофазного механохимического синтеза тетракис(пентафторфенил) боратов трифенилметилкарбония и трифенилциклопропенилия, выявлены некоторые закономерности протекания исследуемых реакций. Полученные бораты показали высокую активирующую способность в реакции полимеризации пропилена

Проявление геометрической фазы Берри в двухспиновых системах

Пичугина Е.С., Бердинский В.Л.
ОГУ, Оренбург

Показано, что знак геометрической фазы Берри зависит от направления обхода замкнутой траектории. В двухспиновых системах, например, в радикальных парах, эффект геометрической фазы одного из спинов эквивалентен синглет-триплетной конверсии. Зависимость знака геометрической фазы Берри от направления обхода позволяет использовать ее для компенсации эффектов динамической фазы, а также для «обращения» динамической эволюции двухспиновой системы во времени.

Влияния структурной организации кластеров золота на адсорбцию этилена, ацетилена, водорода, кислорода и монооксида углерода

Пичугина Д.А., Николаев С.А., Гоголь В.В., Кузьменко Н.Е.
Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Методом функционала плотности изучено взаимодействие C_2H_2 , C_2H_4 , H_2 , CO , O_2 с кластерами Au различной морфологии и состава. Показано, что для активации тестовых молекул требуется наличие атомов Au с низким координационным числом или биметаллических систем Au-Cu и Au-Pd.

Влияние растительных препаратов на свойства воды в нанопорах коллагена по данным ЯМР и калориметрии

Пищур Д.П., Мороз Н.К., Козлова С.Г., Габуда С.П.
ИНХ СО РАН, г. Новосибирск

В настоящем докладе методами ЯМР 1H и сканирующей калориметрии показано, что подвижность воды, как «обычной», так и «связанной» и тепловые эффекты фазового перехода в коллагене зависят от кормления животных и их заболеваний.

Роль гидропероксидных радикалов в процессе ингибированного окисления непредельных соединений

Плисс Р.Е.¹, Москаленко И.В.², Лошадкин Д.В.², Русаков А.И.¹
1. ЯрГУ им. П.Г. Демидова, г. Ярославль
2. ЯГТУ, г. Ярославль

Показано, что эффективность HO_2^\bullet в реакциях обрыва цепей на молекулах антиоксидантов при окислении непредельных соединений разных классов зависит от того обстоятельства, что наряду с HO_2^\bullet в процессе участвуют пероксирадикалы другого строения.

Роль алкоксиаминов и гидроксиламинов в процессе ингибированного нитроксильными радикалами окисления стирола

Богоявленский Д.А.¹, Тихонов И.В.², Плисс Е.М.¹

1. ЯрГУ им. П.Г. Демидова, Ярославль
2. ЯФ ФТИАН РАН, Ярославль

Показано, что алкоксиамины не ингибируют процесс окисления стирола, что говорит об отсутствии вклада реакции алкоксиамина с пероксидным радикалом в регенерацию нитроксильного радикала в процессе ингибированного окисления стирола. Проведена оценка константы скорости реакции гидроксиламина с алкильными радикалами стирола.

Предел устойчивости фронта горения углерода в наклонном вращающемся реакторе.

Подлесный Д.Н., Зайченко А.Ю., Цветков М.В.
ИПХФ РАН, Черногловка

Работа посвящена экспериментальному исследованию фильтрационного горения углерода в наклонном вращающемся реакторе.

Влияние углеродных нанонаполнителей на комплекс свойств синдиотактического полипропилена

*Польщиков С.В.¹, Недорезова П.М.¹, Клямкина А.Н.¹, Аладышев А.М.¹,
Комкова О.М.¹, Крашенинников В.Г.¹, Шевченко В.Г.², Мурадян В.Е.³*

1. ИХФ РАН, Москва
2. ИСПМ РАН, Москва
3. ИПХФ, Черногловка

Композиционные материалы были получены полимеризацией методом *in situ*, в присутствии высокоэффективного изоспецифического катализатора. Проведено изучение комплекса свойств композитов. В композитах диэлектрическая проницаемость практически не зависит от концентрации наполнителя. В данном случае нанонаполнитель выступает в качестве диэлектрического зонда, позволяющего идентифицировать релаксационные переходы в полимерной матрице.

Влияние давления на скорость реакции Дильса-Альдера диэтилазодикарбоксилата с 9,10-диметилантраценом.

Потапова Л.Н., Киселёв В.Д., Корнилов Д.А., Кашаева Е.А., Коновалов А.И.
ФГАОУВПО К(П)ФУ, Казань

Работа посвящена изучению кинетики реакции Дильса-Альдера между диэтилазодикарбоксилатом и 9,10-диметилантраценом в 1,2-дихлорэтане. По данным о влиянии температуры и давления на скорость реакций определены значения энтальпии, энтропии, объема активации и объема реакции.

Влияние растворителя на парциальный мольный объем и энтальпию растворения ферроцена.

Потапова Л.Н., Киселёв В.Д., Кашаева Е.А., Коновалов А.И.
ФГАОУВПО К(П)ФУ, Казань

Изучено влияние растворителя на парциальный мольный объем и энтальпию растворения ферроцена в 18 растворителях.

Реакции фотоизомеризации и фотоциклоприсоединения в бис-стирилхинолиновой диаде с о-ксилиленовым мостиком

Потапова Н.И., Будыка М.Ф., Гавришова Т.Н., Чащихин О.В.
ФГБУН ИПХФ РАН

Показано, что в бис-стирилхинолиновой диаде, в которой два стирилхинолиновых фрагмента связаны между собой о-ксилиленовым мостиком, кроме реакции фотоизомеризации, протекает реакция [2+2] фотоциклоприсоединения с образованием тетразамещенного циклобутана.

Синтез лактида в присутствии п-толуолсульфокислоты.

Похарукова Ю.Е., Яркова А.В., Шкарин А.А., Новиков В.Т.
ТПУ, г. Томск

Исследован синтез лактида в присутствии п-толуолсульфокислоты в качестве катализатора. Выявлено, что время получения олигомера молочной кислоты с добавлением данного катализатора сокращается в 4 раза. Наибольший выход лактида-сырца был получен при концентрациях катализатора менее 0,3%.

Влияние тепловых колебаний и анизотропии энергии дислокации в алюминии на тепловое движение связанных с ними нановключений жидкого свинца

Прокофьев С.И.¹, Йонсон Э.², Дамен У.³

1. ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия
2. Nanoscience Center, NBI, Copenhagen, Denmark
3. NCEM, LBNL, Berkeley, CA, USA

Анализировались траектории теплового движения нановключений жидкого Рb на закрепленных дислокациях в Al, полученные *in-situ* с помощью просвечивающей электронной микроскопии. Обнаруженные особенности усредненных траекторий включений указывают на влияние анизотропии энергии и тепловых колебаний дислокации.

Генерация триплетных состояний каротиноидов по механизму синглет-триплетного деления возбуждения

Проскуряков И.И., Клемина И.Б.
ИФПБ РАН, Пущино

Показана возможность генерации триплетных состояний каротиноидов по механизму синглет-триплетного деления возбуждения Кар в пленках этих пигментов. Впервые измерены спектры ЭПР предшественников ³Кар, дутриплетных комплексов [³Кар³Кар] и проведено исследование их динамических свойств.

Диффузия примесей в поверхностном слое твердого тела с гексагональной структурой

Простнев А.С., Шуб Б.Р., Черныш В.И., Гостева Н.Н.
ИХФ РАН, Москва

Представлены результаты теоретического исследования диффузии примесных атомов, инициированной диффузией вакансий в плотном поверхностном слое, на поверхностной решетке типа “пчелиные соты”. Показано, что при больших временах диффузия примеси имеет нормальный характер и вычислен соответствующий коэффициент диффузии.

Получение водных дисперсий фуллерена C₆₀ и анализ их структуры

Пургина Д.Д., Андреев С.М., Башкатова Е.Н., Хаитов М.Р.
ФГБУ ГНЦ Институт иммунологии ФМБА, Москва

Изучение структуры водной дисперсии фуллерена, полученной диализом водно-N-метилпирролидоновой (МП) смеси, показало, что она содержит частицы диаметром около 100 нм, содержащих фуллерен в форме прочного комплекса с молекулами МП и воды, и, по всей видимости, их поверхность частично модифицирована гидроксильными группами.

Количественная оценка поведения координационных комплексов молекул ненасыщенных липидов с нанокластерами ионов серебра в условиях обращенно-фазовой жидкостной хроматографии

Пчёлкин В.П., Цыдендамбаев В.Д.
ИФР РАН, г. Москва

Тесная взаимосвязь селективности разделения ацилсодержащих липидов с вариациями координационных чисел отдельных атомов Ag в составе его трёхугольных нанокластеров показана по данным анализов трёх классов липидов, включавших остатки жирных кислот природного происхождения, которые были выполнены как в отсутствие, так и в присутствии серебра.

Исследование влияния условий отжига на свойства тонких пленок Cu-Zn-Sn-S, полученных методом PVD

Ракитин В.В.¹, Гапанович М.В.¹, Седловец Д.М.², Новиков Г.Ф.¹
1. ИПХФ РАН, г. Черноголовка
2. ИПТМ РАН, г. Черноголовка

Установлено влияние условий отжига на свойства тонких пленок состава Cu-Zn-Sn-S. Показано, что для получения стабильных однофазных фоточувствительных пленок состава Cu-Zn-Sn-S необходимо использовать оригинальную PVD-методику, с применением интерметаллидов в качестве прекурсоров с последующим отжигом в активной атмосфере серы ($m(S)$ от 5 до 30 мг). Установлено, что обнаруженное влияние условий отжига на свойства получаемых пленок обусловлено изменением параметров кристаллической ячейки и дефектной структуры образцов.

Стохастическое представление модели Колемана-Фокса при описании последовательностей стереохимических конфигураций

Родин В.М., Ловчиков В.А.
ФГУП «НИИСК», Санкт-Петербург

Рассмотрена предложенная Колеманом и Фоксом модель формирования последовательностей стереохимических конфигураций в цепных

макромолекулах, которая ранее считалась немарковской. На основании анализа модельных уравнений показано, что они могут быть представлены марковской статистикой и описывают цепной рост примерно с той же точностью, что и классическая модель Маркова второго порядка.

Значение кинетического моделирования реакционной способности концевых радикальных фрагментов растущих макроцепей сополимеров при исследовании их микроструктуры

Комендантов А.М., Родин В.М., Ловчиков В.А.
ФГУП «НИИСК», Санкт-Петербург

Проведено исследование реакционной способности винилиденфторида при присоединении к различным модельным радикальным активным центрам, позволяющее оценить направление роста макроцепи, а также вероятность влияния на скорости элементарных актов роста предконцевого звена.

Влияние структурной организации металлов на активность синергетических катализаторов окисления и гидрирования

Николаев С.А., Голубина Е.В., Кротова И.Н., Эзжеленко Д.И., Мажуга А.Г., Рудаковская П.Г.
Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Получены синергетические Au-Ce, Au-Cu, Pd-Ce, Pd-Cu, Au-Ni композиты с различной иерархией активных компонентов. Активность композитов измерена в окисления CO при 50 - 450 °С и гидрирования ацетилена при 85 °С. Установлено, что наибольшую активность проявляют системы на основе кластеров Au или Pd, модифицированных оксидами Cu, Ni и Ce.

Исследование поверхности синергетического Au-Cu катализатора методом инфракрасной спектроскопии диффузного отражения

Шилина М.И., Николаев С.А., Ростовщикова Т.Н.
Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Методом инфракрасной спектроскопии диффузного отражения изучены катализаторы состава Au/Al₂O₃, CuO_x/Al₂O₃ и CuO_x/Au/Al₂O₃. Установлено, что модификация золота оксидом меди приводит к формированию в CuO_x/Au/Al₂O₃ высокой плотности новых активных центров Auⁿ (1 < n < 3).

Квантово-химическое описание комплексов M-L (M = Ni, Pt, Pd; L = H₂, C₂H₂, C₂H₄, CO, O₂)

Николаев С.А., Безруков Д.С., Скворцов И.А.
Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Проведено сравнение однореференсных и многореференсных подходов применительно к расчету энергий связывания молекул L (H₂, C₂H₂, C₂H₄, CO, O₂) с атомами металла M (Ni, Pt, Pd). Рассчитанные энергии связи L с M согласуются с известными экспериментальными данными.

Особенности электронного строения и морфологии синергетических катализаторов на основе Au-Ce, Au-Cu, Pd-Ce, Pd-Cu и Au-Ni

Николаев С.А., Кротова И.Н., Эжселенко Д.И.
Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

С помощью просвечивающей электронной микроскопии, инфракрасной и рентгеновской спектроскопий изучена поверхность синергетических Au-Ni катализаторов гидрирования ацетилена и синергетических Au-Ce, Au-Cu, Pd-Ce, Pd-Cu катализаторов окисления монооксида углерода.

Активность кластеров Au и Ni, сформированных методами лазерной электродисперсии, ионного обмена и пропитки, в окислении CO

Николаев С.А.¹, Ростовщикова Т.Н.¹, Голубина Е.В.¹, Локтева Е.С.¹, Кожевникова В.М.², Гуревич С.А.², Кротова И.Н.¹, Эжселенко Д.И.¹

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

На примере кластеров Au и Ni размером 2-4 нм, осажденных на Al₂O₃ с помощью методов лазерного электродиспергирования, ионного обмена и пропитки изучено влияние метода синтеза на активность Au, Ni и Au-Ni катализаторов окисления CO.

Влияние магнитных наночастиц на фотоэлектрические и фотовольтаические характеристики полимерных композитов

Румянцев Б.М.¹, Берендяев В.И.², Леонтьев В.Г.³, Бычкова А.В.¹, Коварский А.Л.¹

¹ИБХФ РАН им. Н.М.Эмануэля, Москва

²НИФХИ им. Л.Я.Карпова, Москва

³ИМЕТ им. А.А.Байкова, Москва

Исследовано влияние магнитных наночастиц (Cu-Ni и частиц магнетита) на фотоэлектрическую чувствительность *p*- и *n*-транспортных слоев фотовольтаических ячеек. Обнаружено влияние наночастиц магнетита на фототок короткого замыкания в фотовольтаических ячейках на основе объемных *p-n* микрогетеропереходов (ПИ +ППДИ в агрегированной форме).

Влияние рентгеновского излучения в диапазоне доз, используемых при медицинских исследованиях, на самоорганизацию и свойства водных растворов ДНК

Рыжкина И.С.^а, Сергеева С.Ю.^а, Муртазина Л.И.^а, Мишина О.А.^а, Кадиров М.К.^а, Сафиуллин Р.А.^а, Рыжкин С.А.^б, Коновалов А.И.^а

^а ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, г. Казань

^б ГБОУ ВПО Казанский ГМУ Минздрава России, г. Казань

Сравнительное изучение распределения частиц по размерам (ДСР) и топографии АСМ-изображений, полученных при исследовании растворов ДНК (10^{-3} и 10^{-12} г/л) до и после облучения, свидетельствует о том, что рентгеновское излучение в изученных дозах вызывает за исключением цифровой флюорографии заметные изменения в самоорганизации растворов, степень выраженности которых немонотонно зависит от режимов исследований.

Бимодальная функция распределения по размерам наночастиц Au, стабилизированных биофлавоноидами

Шестаков А.Ф., Голованова С.А., Садков А.П., Левченко Л.А.

ИПХФ РАН, Город Черноголовка

Методом динамического светорассеяния в сочетании с другими методами спектрального анализа и АСМ исследовано распределение наночастиц в системе HAuCl_4 -биофлавоноид. Установлен бимодальный характер функции распределения НЧ по размерам, не зависящий от концентрации золота, природы биофлавоноида и температуры

Сравнение двух хемилюминесцентных моделей для клинического определения антиокислительной активности плазмы крови человека

Сажина Н.Н.¹, Титов В.Н.²

1. ИБХФ РАН, Москва

2. ФГБУ РКНПК, Москва

Проведена сравнительная оценка двух хемилюминесцентных (ХЛ) методов с разными моделями свободнорадикального окисления: модель «Нв-Н₂О₂-люминол» и «АБАП-люминол» при определении антиокислительной активности плазмы крови больных с патологией печени. Более адекватной можно считать модель окисления с АБАП-инициатором.

Фотопроцессы в димерных комплексах мезо-алкилкарбоцианиновых красителей с кукурбит[7]урилом

Сазонов С.К., Захарова Г.В., Авакян В.Г., Громов С.П., Чибисов А.К.
ЦФ РАН, Москва

Молекулы карбоцианинового красителя в присутствии кукурбит[7]урила и катионов щелочных металлов или аммония образуют димерные комплексы, обнаруживающие в воздушнонасыщенных растворах фосфо-ресценцию и термически активированную замедленную флуоресценцию. Предложена структура комплексов красителей с кукурбит[7]урилом

Адсорбция молекулярного аммиака на нанокластерах платины и титана

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

Средствами сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии установлена константа адсорбции молекул аммиака на нанокластерах платины на платиновой подложке, установлен характер взаимодействия молекулярного аммиака с нанокластерами титана на титановой подложке.

Хемилюминесценция биологически важных молекул: фармакологически перспективные пероксиды и синглетный кислород

Сафаров Ф.Э., Овчинников М.Ю., Хурсан С.Л., Шумаев В.Ю.
ИОХ УНЦ РАН, г. Уфа

Настоящая работа посвящена исследованию различных аспектов хемилюминесценции, возникающей в реакциях синглетного кислорода, а также в реакциях новых классов энергонасыщенных пероксидов – биологически активных 1,2,4-триоксоланов и 1,2,4,5-тетраоксанов.

Молекулярные основы биологической активности и фармакологических свойств противовирусного препарата «Панавир»

Сафронов Д.Ю.¹, Стовбун С.В.¹, Яковенко Л.В.²

1. ИХФ РАН, Москва
2. МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва

Предложена простая физико-химическая модель наночастицы Панавира, позволяющая объяснить его действие механической активацией клеток, включая клетки иммунной системы. Показано, что для проявления всех известных действий Панавира не требуется связывания его частиц с какими бы то ни было супрамолекулярными хиральными рецепторами.

Статистическое моделирование наночастиц некоторых металлов в области перехода от структуры с пятиосевой симметрией к кристаллической структуре.

Мышлявцев А.В., Свалова А.И., Стищенко П.В.
ОмГТУ, Омск

В данной работе исследуется изменение формы и средней энергии атома наночастиц 8 металлов Ni, Cu, Rh, Pd, Ag, Ir, Pt и Au в области перехода от структуры с пятиосевой симметрией к кристаллической структуре. Применен модифицированный алгоритм Метрополиса, основанный на методе Монте-Карло. Построены аналитические приближения исследованных зависимостей.

Адсорбция кукурбит[5]урилы на межфазной границе электрод/электролит

Свиридова Л.Н., Стенина Е.В., Стенин В.Ф.
МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва

Методом спектроскопии электрохимического импеданса исследована структура межфазной границы электрод/электролит в присутствии кукурбит[5]урилы ($C_6H_6N_4O_2$)₅. Выявлена связь адсорбционного поведения супрамолекулярного катионного комплекса кавитанда с его строением и спецификой его взаимодействия с материалом электрода.

Поиск простых модельных систем для оценки влияния рентгеновского излучения на биологические объекты

*Рыжкина И.С.^а, Сергеева С.Ю.^а, Муртазина Л.И.^а, Маргулис А.Б.^б,
Рыжкин С.А.^б*

^аИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, г. Казань

^бКП(Ф)У, г.Казань

^вГБОУ ВПО Казанский ГМУ Минздрава России, г. Казань

Взаимосогласованные результаты биологических и физико-химических исследований позволяют считать, что предложенные в работе подходы могут быть использованы для создания модельных систем для оценки степени радиационной опасности медицинских рентгенологических процедур.

Влияние среды на формирование оксидной структуры Co-Al катализаторов синтеза Фишера-Тропша

Сименцова И.И.¹, Хасин А.А.^{1,2}, Шмаков А.Н.^{1,2}, Черепанова С.В.^{1,2}

1. Институт катализа СО РАН, Новосибирск
2. Новосибирский государственный университет, Новосибирск

Исследовано влияние условий разложения Co-Al гидроталькитов в среде инертного газа и инертного газа, содержащего 3% вес. NO. Показано, что присутствие NO ускоряет процессы рекристаллизации структуры образцов, положительно влияя на степень упорядоченности образующейся оксидной фазы.

Экспериментальное исследование и моделирование суперпозиции полярных эффектов при окислении непредельных соединений

Сирик А.В.¹, Леднев С.Н.², Плисс Е.М.², Русаков А.И.², Лошадкин Д.В.³

¹ЯФ ФТИАН РАН, г. Ярославль

²ЯрГУ, г. Ярославль

³ЯГТУ, г. Ярославль

В настоящей работе сделано предположение о том, что в зависимости от полярности растворителя и субстрата электростатические эффекты доминируют в реакциях продолжения цепей, а константы скорости линейного обрыва отражают суммарное влияние специфической и неспецифической сольватации.

Теоретическое исследование молекулы ThO для поиска электрического дипольного момента электрона.

Скрипников Л.В.^{1,2}, Петров А.Н.^{1,2}, Титов А.В.^{1,2}

1. Санкт-Петербургский государственный университет, С-Петербург
2. Петербургский институт ядерной физики, Гатчина

Вычислена величина эффективного поля, константы псевдоскалярно-скалярного электронно-ядерного взаимодействия, и других параметров метастабильного $^3\Delta_1$ состояния ThO. Объединение этих данных с данными

эксперимента, выполненного коллаборацией АСМЕ, даёт новое ограничение на величину электрического дипольного момента электрона.

Состояние окисления частиц нанесенной Pt при взаимодействии модельных NSR катализаторов с NO₂

Смирнов М.Ю., Калинин А.В., Назимов Д.А., Токтарев А.В., Бухтияров В.И.
ИК СО РАН, Новосибирск

Методом РФЭС исследовано состояние окисления Pt в модельных катализаторах поглощения-восстановления NO_x состава Pt-BaO/MO₂ (M = Ti, Zr, Ti-Zr) при взаимодействии с NO₂. Изучены влияние размера частиц Pt и природы носителя на окисление Pt, зависимость эффективности поглощения NO_x в виде нитрита и нитрата Ba от состояния окисления Pt.

Влияние состава реакционной среды и природы носителя на термическую стабильность наночастиц золота на поверхности оксидов

Смирнов М.Ю., Вовк Е.И., Калинин А.В., Герасимов Е.Ю., Бухтияров В.И.
ИК СО РАН, Новосибирск

Методами РФЭС и ПЭМ исследована термическая стабильность Au-наночастиц в модельных катализаторах Au/Al₂O₃ и Au/Fe₂O₃ по отношению к спеканию в вакууме и при взаимодействии с газовой реакционной средой (O₂, CO, CO+O₂, H₂O). Установлена существенно более высокая стабильность частиц на поверхности Al₂O₃.

Исследование фотохромных и флуоресцентных свойств диарилэтенон и хроменов, содержащих производные диметиланилина

Смоленцев А.Б.¹, Глебов Е.М.^{1,2}, Королев В.В.¹, Федорова О.А.³

1. ИХКГ СО РАН, Новосибирск
2. НГУ, Новосибирск
3. ИНЭОС РАН, Москва

Исследованные соединения обладают фотохромными и флуоресцентными свойствами. Флуоресценция обусловлена образованием состояния TICT, стабилизирующегося в полярных растворителях. Окрашенные изомеры соединений не флуоресцируют из-за эффективного переноса энергии, что позволяет управлять излучательной способностью при помощи света.

Термохимическое преобразование тонких пленок фторида лития

Софич Д.О.^{1,3}, Лазарева Н.Л.^{1,2}

1. ИФ ИЛФ СО РАН, г. Иркутск
2. ФГБОУ ВПО ИГУ, г. Иркутск
3. ФГБОУ ВПО НИ ИрГТУ, г. Иркутск

В работе исследовались тонкие пленки фторида лития, изменения в их структуре после отжига, описана оригинальная методика создания центров окраски при помощи барьерного разряда. Объяснен процесс увеличения исходных наноразмерных зерен фторида лития при увеличении температуры отжига.

Определение констант ионизации никотиновой кислоты методом безбуферной спектрофотометрии

Старикова Т.А., Лысова С.С., Зевацкий Ю.Э.
СПГУТД, г. Санкт-Петербург

Показана возможность использования безбуферной спектрофотометрии для определения значений термодинамических констант ионизации никотиновой кислоты в водных растворах, не требующей измерений кислотности среды. Получены значения термодинамических констант никотиновой кислоты в водном растворе при 25°C: $pK_{a1}^T=2.33$ и $pK_{a2}^T=4.72$.

Транспортные характеристики полупроводниковых УНТ с адсорбированными атомами водорода

Судоргин С.А., Лебедев Н.Г.
ВолГУ, Волгоград

Получены аналитически и проанализированы численно транспортные характеристики полупроводниковых углеродных зигзагообразных нанотрубок (удельная электропроводность и коэффициент диффузии электронов).

Эффекты взаимовлияния элементов при горении конструкций из полимерных материалов

Рудакова Т.А.¹, Сухов А.В.²

1. ИСПМ РАН, г. Москва
2. ФБУ РФЦСЭ при МЮ РФ, г. Москва.

В настоящее время широко применяются ячеистые и сотовые листовые и пленочные полимерные материалы, представляющие собой ряд

параллельных воздушных каналов, разделенных тонкими перегородками или закрытых изолированных ячеек. В работе были исследованы параметры процесса горения для конструкций различной геометрии. Выявлены эффекты взаимовлияния слоев при горении сотовых и ячеистых материалов, меняющие параметры процесса при горении конструкции.

Образование углеродных структур при термолизе твердых отходов пластмасс

Сыченко Д.В.¹, Володин А.М.², Бедило А.Ф.², Ларичкин В.В.¹

1. НГТУ, Новосибирск

2. ИК СО РАН им. Г.К. Борескова, Новосибирск

Показана возможность утилизации полимерных материалов, входящих в состав твердых бытовых отходов, при термолизе этих материалов в условиях РАРЕТ с получением структурированного углерода, который может использоваться при конструировании композитов и в других практических приложениях.

Экспериментальное и модельное исследование кинетики сушки и восстановления гидроксидов железа

Теплов О.А., Лайнер Ю.А.
ИМЕТ РАН, Москва

Для интерпретации протекающих в красном шламе процессов разработана и применена математическая модель кинетики газового восстановления дисперсных материалов в слое. Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными, полученными термо-гравиметрическим методом на установке ТАГ 24 "СЕТАРАМ".

Кинетика образования зародышей частиц сажи при использовании различных промоторов и ингибиторов процесса сажеобразования.

Агафонов Г.Л.¹, Билера И.В.², Власов П.А.^{1,3}, Колбановский Ю.А.², Смирнов В.Н.¹, Тереза А.М.¹

¹ИХФ РАН, Москва

²ИНХС РАН, Москва

³НИИЯУ «МИФИ», Москва.

Исследована кинетика образования частиц сажи в ударных волнах в процессе пиролиза и окисления богатых смесей алифатических углеводородов, как с

одинарными, так и кратными связями в присутствии различных промоторов и ингибиторов сажеобразования.

Влияние колебаний на термодинамические параметры равновесия кристалл – пар и жидкость – пар в леннард-джонсовской системе

Титов С.В., Серов С.А., Островский Г.М., Товбин Ю.К.

ГНЦ РФ НИФХИ им. Л.Я.Карпова, Москва

Изучено влияние различных способов расчёта частот колебаний в леннард - джонсовской системе на её термодинамические параметры равновесия кристалл – пар и жидкость – пар с помощью квазихимического приближения в модели решёточного газа.

Расчет колебательных движений адсорбата в аморфном состоянии жидкости в ходе диффузионной релаксации системы при пониженных температурах

Комаров В.Н., Товбин Ю.К.

ГНЦ РФ НИФХИ им. Л.Я.Карпова, Москва

На основе кинетических уравнений для релаксации стекол при пониженных температурах разработана методика расчета диффузионного перераспределения адсорбата, находящегося во внешнем поле адсорбента, с учетом колебательных движений молекул. Скорости элементарных перемещений молекул зависят от колебательного вклада двояким образом: колебания меняют энергии межмолекулярного взаимодействия и вклад в перемещения молекул влияют только локальные и антифазные движения.

Термодинамических свойств газообразных лактонов в интервале 298-1500 К

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

¹ ТвГУ, Тверь

² ТГМА, Тверь

³ КФУ, Казань

В рамках ангармонического приближения с учетом конформационного состава были найдены термодинамические свойства $\Delta_f H_T^0, \Delta_f G_T^0, S^\circ, C_p$ лактонов с размером цикла n от 4 до 8 атомов в температурном интервале 298-1500 К.

Тушение триболюминесценции сульфатов лантанидов в атмосфере многоатомных газов

Тухбатуллин А.А., Шарипов Г.Л.
ФГБУН Институт нефтехимии и катализа РАН, Уфа

Исследована триболюминесценция кристаллов сульфатов лантанидов в атмосфере O_2 , CO_2 , SF_6 , SO_2 . Напуск O_2 и CO_2 тушит газовую компоненту свечения – излучение $*N_2$; SF_6 и SO_2 тушат также свечение ионов $*Ln^{3+}$. Их дезактивация происходит на межфазной границе, предположительно, по механизму электронно-колебательного размена энергии.

Влияние химической обработки на фазовый состав поверхности и электрофизические характеристики барьеров Шоттки на высокоомном кремнии.

Базлов Н.В.¹, Котина И.М.², Тухконен Л.М.², Щукарев А.В.

1. СПбГУ, Санкт-Петербург
2. ПИЯФ, Гатчина

Измерены спектры РФЭ и DLTS, изучены вольт-амперные и вольт-емкостные характеристики барьеров Шоттки на высокоомном p Si (111) после различных химических обработок поверхности. Показана связь между структурой, фазовым составом поверхности и электрофизическими характеристиками барьеров Шоттки.

Формирование металлических наноструктур при жидкофазном горении системы на основе алюминия и оксидов никеля и кобальта.

Уваров В.И.⁽¹⁾, Боровинская И.П.⁽¹⁾, Цодиков М.В.⁽²⁾, Федотов А.Б.⁽²⁾

¹ИСМАН, г. Черноголовка

²ИНХС РАН, г. Москва.

Данная работа посвящена формированию металлических наноструктур при жидкофазном горении системы на основе алюминия, оксидов никеля, кобальта ($NiO-Al-Co_3O_4$) и получение из них высокотемпературных, коррозионностойких, механически-прочных, каталитически активных мембран.

Разложение физиологически активных высокотоксичных компонентов жидких ракетных топлив на поверхности кремнезема

Ульянов А.В., Полунин К.Е., Полунина И.А., Буряк А.К., Пыцкий И.С.
ИФХЭ РАН, Москва

Методами газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием исследовано разложение несимметричного диметилгидразина, примесей в нем и образующихся продуктов его трансформации на поверхности кремнезема. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 12-08-01168.

Характерные особенности строения семичленного цикла в β – трополонах.

Утеньшиев А.Н.^а, Ткачев В.В.^а, Боженко К.В.^а, Саятин Ю.А.^б, Алдошин С.М.^а

^а ИПХФ РАН, Черноголовка,

^б ЮНЦ РАН, Ростов-на-Дону

Квантово- химически исследованы соединения трополона с различным периферийным окружением трополонового цикла в приближении B3LYP/6-311G** с полной оптимизацией геометрии. Показано, что для них энергетически наиболее выгодной является конформация «ванны» и найдено только два вида критических точек.

Анализ влияния природы растворителя на скорость реакции третичных фосфинов с неопределёнными карбоновыми кислотами на основе принципа линейности свободных энергий.

Фатхутдинов А.Р., Салин А.В., Ильин А.В., Галкин В.И., Шамсутдинова Ф.Г.
КФУ, Казань

Влияние природы растворителя на скорость реакции третичных фосфинов с неопределёнными карбоновыми кислотами наилучшим образом описывается двухпараметровым уравнением, включающим основность растворителя B по Пальму и полярность растворителя E_T по Рейхардту, с наиболее значимым негативным вкладом параметра B .

Эффект анхимерного содействия в реакции третичных фосфинов с неопределёнными карбоновыми кислотами.

Фатхутдинов А.Р., Салин А.В., Ильин А.В., Галкин В.И., Шамсутдинова Ф.Г.
КФУ, Казань

В ходе исследования кинетики и механизма кватернизации третичных фосфинов неопределёнными карбоновыми кислотами обнаружен эффект анхимерного содействия для реакций с участием малеиновой и *цис-*

аконитовой кислот. Происхождение данного эффекта объяснено на основе пространственной структуры возникающих интермедиатов.

Физико-химические основы каталитических процессов с участием норборнадиена

Флид В.Р., Шамсиев Р.С., Морозова Т.А., Дураков С.А.
МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва

Разработаны новые технологичные металлокомплексные гомогенные и гетерогенные катализаторы для реакций с участием норборнадиена. Сочетание теоретических и экспериментальных подходов позволило осуществить молекулярный дизайн каталитических систем, детализировать механизмы, оптимизировать условия протекания реакций.

Сравнительный анализ структуры и фазового поведения карбоксилановых дендримеров с фрагментами α, α' -диалкилкватротиофена

Харламов А.А.^{1,2}, Щербина М.А.¹, Бакиров А.В.¹, Борщев О.В.¹, Лупонос Ю.Н.¹, Пономаренко С.А.¹, Чвалун С.Н.³

1. ИСПМ РАН, Москва
2. МИТХТ, Москва
3. НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Методами больше- и малоуглового рассеяния, дифференциальной сканирующей калориметрии, поляризационной оптической микроскопии и молекулярного моделирования проведен сравнительный анализ структуры и фазового поведения карбоксилановых дендримеров различной генерации на основе α, α' -диалкилкватротиофена (количество концевых групп $n=4$ (G0), 8 (G1), 32 (G3), 60 or 115 (G5)). Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 12-03-00671).

Устойчивость CaCl_2 в условиях фильтрационного горения

Цветков М.В., Полианчик Е.В.
ФГБУН ИПХФ РАН, Черноголовка

Работа посвящена теоретическому и экспериментальному исследованию устойчивости CaCl_2 в режиме фильтрационного горения. Проведены термодинамические расчёты устойчивости CaCl_2 в условиях, близких к

реальным условиям в реакторе-газификаторе. Показано хорошее соответствие экспериментальных и расчётных данных.

Особенности сополимеризации пропилена с метилвинилкетонем в массе пропилена.

*Чанурина А.В.¹, Недорезова П.М.¹, Клямкина А.Н.¹, Крашенинников В.Г.¹,
Аладышев А.М.¹, Монахова Т.В.², Марголин А.Л.²*

¹ИХФ РАН, Москва

²ИБХФ РАН, Москва

Получен и охарактеризован ряд сополимеров пропилена и МВК. Выявлено, что заметное внедрение МВК возможно только при проведении сополимеризации на МЦ-2/МАО. Установлено, что уже при небольшом содержании МВК ПП приобретает способность быстро, но контролируемо разрушаться в естественных условиях.

Синтез, спектральные и фотохимические свойства гибридных органо-неорганических наноструктур на основе квантовых точек CdS и стирилхинолинового лиганда

Чащихин О.В., Ли В.М., Гавришова Т.Н., Будыка М.Ф.
ИПХФ РАН, г.Черноголовка

Проведен одностадийный (без обмена лигандов) синтез новой гибридной органо-неорганической наноструктуры на основе квантовых точек CdS и органического лиганда - производного стирилхинолина. Переводя лиганд (под действием света) из транс-изомера в цис-изомер и обратно, можно управлять люминесценцией гибридной наносистемы в целом.

Синтез квантовых точек CdS при помощи микроволнового нагрева.

Чащихин О.В.¹, Никулин П.А.², Будыка М.Ф.¹

1. ИПХФ РАН, г.Черноголовка

2. МГУ им. Ломоносова, г.Москва

При помощи микроволнового нагрева синтезирован ряд квантовых точек CdS. Показано, что при увеличении относительной концентрации стабилизирующего агента уменьшается размер получаемых КТ, а квантовый выход люминесценции КТ одного размера возрастает.

Излучение суперпозиционного состояния резонансного фотона двухуровневым атомом в одномерном сверхдобротном нанорезонаторе

Чельцов В.Ф.

IoP (UK) EUROSCIENCE EPS

В работе кратко изложены результаты теоретического анализа спонтанного резонансного дипольного линейно поляризованного излучения двухуровневого атома в одномерном нанорезонаторе с резонансной модой и скоростью утечки фотона много меньшей постоянной взаимодействия атома с полем излучения. Показано, что выходящее из резонатора излучение представлено суперпозиционным состоянием двух фотонов, поляризованных противофазно, с сохраняющимися суммарной энергией, импульсом и нулевой проекцией спинов на плоскость поляризации

Новые высокоактивные в видимом диапазоне фотокатализаторы на основе $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}/\text{Zn}(\text{OH})_2$ для выделения водорода из водных растворов этанола

Козлова Е.А.^{1,2,3}, Марковская Д.В.^{1,2}, Черепанова С.В.^{1,2,3}, Герасимов Е.Ю.^{1,2,3}

1. ИК СО РАН, Новосибирск
2. НГУ, Новосибирск
3. НГУ НОЦ ЭК, Новосибирск

Исследование композитов типа $\text{Pt}/\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}/\text{ZnO}/\text{Zn}(\text{OH})_2$ с варьируемым содержанием ZnO и $\text{Zn}(\text{OH})_2$ показало, что составы $\text{Pt}/\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}/\text{Zn}(\text{OH})_2$ обладают более высокой по сравнению с $\text{Pt}/\text{Cd}_{1-q}\text{Zn}_q\text{S}$ и $\text{Pt}/\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}/\text{ZnO}$ активностью, что, по-видимому, связано с лучшим разделением зарядов вследствие возникновения гетеропереходов между $\text{Cd}_{1-q}\text{Zn}_q\text{S}$ и $\text{Zn}(\text{OH})_2$.

Особенности кинетических эффектов поверхностной сегрегации атомов кадмия на границе механически обновляемого электрода из сплава $\text{Ag}-\text{Cd}$ с раствором поверхностно неактивного электролита

Чоба М.А.¹, Сафонов В.А.¹, Алешин Ю.К.²

1. МГУ имени М.В.Ломоносова, химический факультет, г. Москва
2. МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, г. Москва

С использованием традиционных электрохимических методов (импедансной спектроскопии и циклической вольтамперометрии) в сочетании с методом Оже электронной спектроскопии на примере системы $\text{Ag}-\text{Cd}$ изучены кинетика и механизм процесса преимущественного концентрирования в поверхностном слое сплава атомов Cd .

Формирование Fe- и Co-содержащих каталитических суспензий для синтеза Фишера-Тропша *in situ* в реакционной среде

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

В ИНХС РАН предложен новый оригинальный подход к формированию устойчивых каталитических металлосодержащих суспензий, проявляющих высокую активность в синтезе Фишера-Тропша в условиях трехфазной системы (сларри-реактор).

Новые *P,N*-бидентатные лиганды на основе NOBIN как стереоселекторы в Pd-катализируемых асимметрических превращениях

Чучелкин И.В., Бочелюк М.С., Ваганова Ю.А.
РГУ имени С.А. Есенина, г. Рязань

Получены новые *P,N*-бидентатные диастереомерные лиганды фосфитной природы, на основе NOBIN. Стереоселекторы были протестированы в Pd-катализируемом асимметрическом аллильном замещении (*E*)-1,3-дифенилаллилацетата (до 88% *ee*), и в алкилировании циннамилацетата этил 2-оксоциклогексанокарбоксилатом (до 62% *ee*).

Совместное окисление метана и этилена в объемных проницаемых матрицах

Шапвалова О.В.¹, Погосян Н.М.², Погосян М.Дж.³, Арутюнов В.С.¹

1.ИХФ РАН, Москва

2.РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина, Москва

3.Институт химической физики им. А.Б. Налбандяна НАН Республики Армения, Ереван

В работах ИХФ НАН РА было показано значительное влияние метана на состав продуктов окислительного крекинга этилена и пропана. Одновременно в ИХФ РАН были разработаны новые методы получения стабильных сверхбогатых пламен метана, являющихся эффективным источником метильных радикалов. Комбинация этих результатов открывает перспективы создания принципиально новой технологии получения важнейших базовых нефтехимических продуктов – пропилена и более тяжелых олефинов.

Применение методов теории функционала плотности для изучения строения и люминесцентных свойств N,O-хелатированных гомолептических комплексов редкоземельных металлов.

Шестаков А.Ф.

ИПХФ РАН, г. Черноголовка.

С помощью подхода теории функционала плотности изучено строение и электронная структура комплексов N,O-хелатированных гомолептических комплексов редкоземельных металлов в основном и первом возбужденных состояниях. Эти данные позволили связать их люминесцентных свойства с характером искажения координационной сферы металла при возбуждении.

Подход к химическому моделированию метанмонооксигеназы

Штейнман А.А.

ИПХФ РАН, г. Черноголовка

С целью создания структурной модели активного центра sMMO были сконструированы полидентатные каркасные динуклеирующие лиганды, являющиеся отдаленными аналогами полипептидного каркаса металлофермента, и синтезированы биядерные μ -карбоксилатные комплексы железа(III и II), моделирующие sMMO.

Исследование фазовых превращений в процессе приготовления делафоссита CuAlO_2

*Штерцер Н.В.^{1,2}, Хасин А.А.^{2,1}, Пахарукова В.П.^{1,2}, Минюкова Т.П.¹,
Юрьева Т.М.¹, Докучиц Е.В.^{2,1}*

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

Делафосситы CuMO_2 являются функциональными материалами с необычными физико-химическими свойствами. В настоящей работе с помощью термического и рентгенофазового анализов проводилось изучение процесса формирования делафоссита CuAlO_2 в ходе взаимодействия нитрата алюминия и оксида меди CuO .

Характеризация электроноакцепторных центров на поверхности сульфатированного оксида алюминия методом ЭПР

Шуваракова Е.И.^{1,2}, Бедило А.Ф.^{1,2}

1. ИК СО РАН, Новосибирск
2. НТИ МГУДТ, Новосибирск

Зависимости концентраций электроноакцепторных центров различной силы на поверхности сульфатированного Al_2O_3 от содержания сульфатов были исследованы методом ЭПР с использованием спиновых зондов. Были выработаны рекомендации по методике использования спиновых зондов для тестирования электроноакцепторных центров.

Роль электроноакцепторных центров в процессах деструктивной сорбции CF_2Cl_2 на нанокристаллических MgO и VOx/MgO

*Шуваракова Е.И.^{1,2}, Бедило А.Ф.^{1,2}, Мишаков И.В.^{1,3}, Ведягин А.А.^{1,3},
Ильина Е.В.¹, Володин А.М.¹, Чесноков В.В.^{1,3}*

1. ИК СО РАН, Новосибирск
2. НТИ МГУДТ, Новосибирск
3. НГТУ, Новосибирск

Исследованы влияние промотирования нанокристаллических аэрогелей MgO небольшими количествами ванадия на деструктивную сорбцию фреона CF_2Cl_2 , и изменения концентрации электроноакцепторных центров в ходе реакции. Обнаружено существование хороших корреляций между концентрациями электроноакцепторных центров и скоростью реакции.

Особенности генерации электронной спиновой поляризации радикалов в процессах тушения триплетных состояний молекул.

Сакун В.П., Гатин А.К., Шушин А.И., Овчинникова М.Я.
ИХФ РАН, Москва

Обсуждается механизм генерации химической поляризации электронов (ХПЭ) радикалов (R) в процессах тушения триплетных (T) возбуждений, основанный на предположении, что ХПЭ обусловлена неадиабатическими переходами между термами спин-гамильтониана TR пар. Предсказания механизма подтверждаются результатами экспериментов.

Аномальная миграция поляронов в неупорядоченных органических полупроводниках и ее проявление в магнитных эффектах

Шушин А.И., Чайкина Ю.А., Курсанкин А.А., Кожушнер М.А.
ИХФ РАН, Москва

Теоретически проанализированы особенности аномальной (дисперсионной) миграции поляронов (P) (т.е. электронов и дырок) в неупорядоченных

органических полупроводниках и проявление этих особенностей в магнитных эффектах в проводимости полупроводников.

Структура и фазовое поведение смесей самоорганизующихся секторообразных дендронов и виологена

Мещанкина М.Ю.¹, Бакиров А.В.², Щербина М.А.¹, Чвалун С.Н.^{1,2}, Бегинн У.³, Асафтеи С.³

1. ИСПМ РАН, Москва
2. НИЦ «Курчатовский институт», Москва
3. Universitdt Osnabruck, Neuer Graben 29, 49074 Osnabruck, Germany

Проведен сравнительный анализ фазового поведения смесей самоорганизующихся секторообразных дендронов (3,4,5-трис(додецилокси)бензолсульфонат цезия) и виологенов различного химического строения. Построена модель взаимной организации дендронов разного типа и формирования ими двумерной колончатой гексагональной мезофазы.

Увеличение чувствительности и избирательности модифицированного спектрометра подвижности ионов для обнаружения и распознавания взрывчатых веществ

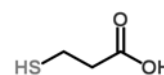
Эпинатьев И.Д.
ИХФ РАН, Москва

Модифицированный образец спектрометра (СПИ) обеспечил решение задачи повышения чувствительности и избирательности при детектировании газообразных компонентов ВВ за счет предложенной конструкции предварительного концентратора и повысил скорость обработки поступающей на дисплей информации об обнаруженном ВВ.

EXAFS- исследование комплекса Vi (III) с 3-меркаптопропионовой кислотой (H₂MPA) в растворе HClO₄ и твердого комплекса Vi, содержащего (MPA)

Эренбург С.Б.¹, Трубина С.В.¹, Петров А.И.², Дергачев И.Д.², Головнев Н.Н.²
¹ИНХ СО РАН, Новосибирск, Россия
²ИЦММ Сибирского Федерального Университета, Красноярск, Россия

Проведено сравнительное исследование структуры комплекса Vi(III) с (H₂MPA) в растворе хлорной кислоты и твердого комплекса Vi, содержащего (MPA). Установлено, что в твердом комплексе



лиганды координированы к висмуту двумя атомами серы, а также четырьмя атомами кислорода на двух различных расстояниях. В растворе к атому висмута координированы три лиганда (МРА) с межатомными расстояниями Bi-S 2.51 Å и Bi-O 2.70 Å.

ЭПР исследование взаимного влияния спиновых носителей зарядов в полимерных композитах на основе полианилина, предельно допированного *n*-толуолсульфокислотой, и поли-(3-додецилтиофена).

Юданова Е.И., Криничный В.И., Богатыренко В.Р.
ФГБУН ИПХФ РАН, г.Черноголовка

Показано, что процесс обменного взаимодействия в композитах из полианилина, допированного *para*-толуол-сульфокислотой, и объемного гетероперехода на основе поли-(3-додецилтиофена) определяется взаимным влиянием спиновых носителей зарядов, составом композита и структурно-морфологическими изменениями в этих системах.

Влияние ионизации на упругие свойства однослойных углеродных нанотрубок: квантовохимическое исследование

Юрьев М.Ю., Петрушенко И.К.
ИрГТУ, Иркутск, Россия

В данной работе методами квантовой химии были рассчитаны модули упругости (Юнга, объемный модуль упругости и модуль сдвига), а также коэффициент Пуассона для ионизированных моделей однослойных углеродных нанотрубок (ОУНТ). Обнаружено уменьшение всех исследуемых параметров ОУНТ при их ионизации.

Зависимость проводящих свойств полимерного электролита ДАк-ПЭГ - LiBF_4 – ионная жидкость (BMIBF_4 и EMIBF_4) от состава

Ярмоленко О.В., Юдина А.В., Игнатова А.А., Шувалова Н.И.
ИПХФ РАН, Черноголовка

Исследован специфичный характер зависимости свойств полимерного электролита ДАк-ПЭГ – LiBF_4 – ионная жидкость (1-бутил-3-метилимидазолий тетрафторборат и 1-этил-3-метилимидазолий тетрафторборат) от состава, изученный с помощью спектроскопии электрохимического импеданса и метода ДСК.

Авторский указатель

- Ge J.*, 57
Ho Y.C., 39
Katasa P., 71
Ni C.K., 39
Ortiz J.V., 88
- A**
- Аббасов Я.А.*, 106
Авакян В.Г., 117
Авдеев В.И., 66
Авдеева Е.И., 96
Агафонов Г.Л., 29, 122
Агина Е.В., 60
Акберли Г.Н., 42
Акименко С.С., 63, 101
Акимова Т.Н., 87
Аксенова Ю.В., 63
Аладышев А.М., 110, 127
Албантова А.А., 80
Алдошин С.М., 69, 125
Алексенский А.Е., 67
Алешин Ю.К., 128
Али Шейх Бостанабад, 89
Алиева Н.М., 42
Аминова Р.М., 74
Андреев С.М., 63, 65, 112
Анкудинов А.В., 43
Антипин И.С., 69
Антонов Д.О., 57, 64
Антропова И.Г., 105
Аржакова О.В., 78
Аронзон Б.А., 32
Арутюнов В.С., 50, 129
Арутюнян А.Б., 32, 65
Асафтеи С., 132
Астафьев А.А., 93
Асфандиаров Н.Л., 32
Аулов В.А., 74
Афоничева О.В., 64
- Б**
- Бабкин В.С.*, 64
Бабкина О.Н., 81
Багаева М.И., 64
Багрянская Е.Г., 33
Базлов Н.В., 124
Бакеев Н.Ф., 78
Бакиров А.В., 60, 81, 101, 126, 132
Бакланова О.В., 70
Балабаньян В.Ю., 99
Балашов Е.М., 35, 70
Барабанов А.А., 33
Барбаев И.Г., 96
Бардышев И.И., 102
Барская И.Ю., 33
Барский Д.А., 33
Басов Н.Л., 57, 64
Башкатова Е.Н., 65, 112
Бегинн У., 132
Бегларян А.А., 32, 65
Бедило А.Ф., 34, 66, 87, 122, 130, 131
Безруков Д.С., 115
Белашов А.В., 66
Белов Г.П., 86
Белоненко М.Б., 103
Белоусов С.И., 66, 67
Белых С.И., 67, 98
Бельшева Т.В., 30
Бельтюкова Д.М., 67
Беляев С.Н., 68
Бердинский В.Л., 96, 97, 109
Березин М.П., 68
Березкина Н.Г., 104
Берендяев В.И., 115
Берестнева Ю.В., 68
Бехли Л.С., 77
Билера И.В., 122
Бинюков В.И., 80
Богатыренко В.Р., 102
- Богданова Л.М.*, 36
Богословская О.А., 91
Богоявленский Д.А., 110
Боднева В.Л., 30
Боженко К.В., 69, 125
Болодурина А.И., 74
Болотов В.А., 69
Большова Т.А., 64
Борисов И.М., 98
Боровинская И.П., 124
Боровков Н.Ю., 69
Борщ Н.А., 34
Борщев О.В., 60, 126
Бочелюк М.С., 73, 105, 129
Бравая Н.М., 100, 108
Брагин А.А., 48
Брагина Е.Е., 64
Браташов Д.Н., 88
Бревнов П.Н., 70, 73, 81
Бричкин С.Б., 35, 73
Бубнов В.П., 104
Бугрова Т.А., 99
Буданов Б.А., 35, 70
Будыка М.Ф., 35, 70, 97, 111, 127
Будько А.П., 99
Бузин А.И., 71
Бузин М.И., 71
Булавченко О.А., 94, 105
Бунев В.А., 64
Бурилов В.А., 79
Буркова С.Л., 63
Буряк А.К., 124
Бусыгина Е.А., 71
Бухтияров В.И., 42, 120
Бычкова А.В., 90, 115
- В**

- Ваганова Ю.А., 129
 Вайнер Б.Г., 28
 Вальнюкова А.С., 35
 Варганов Р.Д., 39
 Варламов Д.А., 28
 Варфоломеева В.В., 71
 Васютинский О.С., 28, 53, 66, 67
 Вебер А.А., 72
 Вебер С.Л., 33
 Ведерников А.И., 47
 Ведягин А.А., 88, 131
 Видяшева И.В., 89
 Виноградов А.Н., 86
 Витковская Н.М., 72, 96
 Власов П.А., 55
 Власов П.А., 122
 Вовк Е.И., 120
 Водолазкина Д.А., 72
 Возчикова С.А., 82
 Волков В.Т., 36, 91
 Волков И.О., 64
 Волкова Н.Н., 36
 Володин А.М., 88, 122, 131
 Волохов А.В., 28
 Волохов В.М., 28
 Волынский А.Л., 78
 Воробьев А.С., 32
 Восмеригов А.В., 103
 Втюрина Д.Н., 72
 Вуль А.Я., 67
 Вяткин А.Ф., 91
- Г**
- Габриелян А.А., 65
 Габриелян Н.А., 95
 Габуда С.П., 90, 109
 Гаврилов В.К., 73, 80
 Гаврилов В.Ю., 37, 40
 Гаврилов К.Н., 36
 Гаврилов Ю.А., 73
 Гавришова Т.Н., 70, 97, 111, 127
- Гагиева С.Ч., 100
 Гаджиев О.Б., 41, 107
 Гак В.Ю., 73
 Галиуллин А.Н., 108
 Галиуллин Р.А., 40
 Галкин В.И., 125
 Галлямов М.Р., 103
 Гапанович М.В., 74, 113
 Гаранин В.А., 78
 Гатауллин А.Р., 74
 Гатауллина А.Р., 99
 Гатин А.К., 37, 58, 76, 117, 131
 Гельперина С.Э., 99
 Герасимов Г.Н., 30
 Герасимов Е.Ю., 120, 128
 Герасько О.А., 61
 Гетлинг З.М., 64
 Гехман А.Е., 31, 79
 Гизатуллин Б.И., 87
 Глазов С.В., 43, 88, 91
 Глебов Е.М., 120
 Глуховской Е.Г., 88, 89
 Глущенко Н.Н., 91
 Гоголь В.В., 109
 Голованова С.А., 116
 Головнев Н.Н., 132
 Голубев В.К., 37, 38
 Голубев Е.К., 74
 Голубева Е.Н., 38
 Голубина Е.В., 114, 115
 Голубков Г.В., 106
 Голубков М.Г., 106
 Гольданский А.В., 102
 Гомберг М.А., 64
 Горбачев И.А., 89
 Горбунов В.А., 63
 Гордон Д.А., 75
 Гордон Е.Б., 28
 Горенберг А.Я., 73
 Горин Д.А., 89
 Горностаева Е.В., 95
 Горшенев В.Н., 75
 Горшков В.А., 38, 49
 Горшкова М.Ю., 99
- Гостева Н.Н., 112
 Грабовский С.А., 77
 Грасс В.Э., 75
 Гребенщиков Ю.Б., 76
 Гренев И.В., 37
 Гривин В.П., 52
 Григорьев Т.Е., 39
 Григорян Г.Л., 65
 Гриднев А.А., 77
 Гринев В.Г., 54, 104
 Грирорян Г.Л., 32
 Гришин М.В., 37, 58, 76, 78, 88, 117
 Гришина М.А., 79
 Громов В.Ф., 30
 Громов О.И., 38
 Громов С.П., 47, 117
 Groшкин Н.Н., 36
 Губанов М.А., 59, 77, 79
 Губарев Ю.А., 69
 Гудков М.В., 77
 Гудошников С.А., 76
 Гулмуродов К.С., 77
 Гуломов Ш.Т., 61
 Гумаргалиева К.З., 86
 Гуревич С.А., 43, 115
- Д**
- Далидчик Ф.И., 35, 70
 Дамен У., 112
 Данишевский А.М., 39
 Дементьева О.С., 129
 Демидов Ю.А., 44
 Денисов Н.Н., 54
 Дергачев И.Д., 132
 Джалалова Ш.Б., 61
 Дзюба К.А., 81
 Дмитриева С.Н., 47
 Дмитрияков П.В., 71
 Добровольский Ю.А., 87
 Докучиц Е.В., 130
 Долгова А.А., 78
 Долматов В.Ю., 45

Домалега М.Г., 51
Дохликова Н.В., 76, 78
Дремова Н.Н., 36
Дубовицкий В.А., 78
Дураков С.А., 57, 126
Дыбцев Д.Н., 103
Дьяков Ю.А., 39

Е

Егоров Е.В., 102
Елецкий А.В., 83
Елистратова Ю.Г., 79
Елькин Ю.Н., 32
Емельяненко В.Н., 123
Еремина Н.В., 42
Еркимбаев А.О., 83
Ермаков А.В., 89
Ермилов А.Ю., 52
Ермолина Е.Г., 63
Ефремов В.П., 40

Ж

Жаворонков А.И., 79
Жарова П.А., 59, 79
Жданова Е.С., 79
Жеглов С.В., 80, 105
Жигачева И., 80
Жигачева И.В., 80
Жидомиров Г.М., 38
Жиляева Е.И., 81
Жирнов А.А., 79
Жужгов А.В., 69
Жуков А.Н., 39, 62
Журавлева Т.С., 81, 82

З

Заболотнов А.С., 81
Завьялов С.А., 81, 82,
95
Загайнов И.В., 82
Загуляев С.Н., 40
Зайковский В.И., 61
Зайцевский А.В., 44, 56
Зайченко А.Ю., 43, 110

Залесский А.Д., 93
Запороцкова И.В., 94
Зараменских К.С., 72
Захаров В.А., 33, 44
Захаров В.В., 82
Захаров С.И., 80
Захаров Ю.А., 35
Захарова Г.В., 117
Захарченко Е.О., 93
Здвижков А.Т., 71
Зевацкий Ю.Э., 98, 121
Земцов Л.М., 83
Зенковец Г.А., 40, 105
Зиборов В.С., 40, 55
Зимарев В.С., 80
Зицерман В.Ю., 83
Зленко Д.В., 41, 55
Зотов Д.А., 78
Зюзин И.Н., 83, 89

И

Иванов А.И., 41, 52
Иванов Д.А., 94, 97
Иванов М.Ф., 54
Иванов П.Л., 41
Иванова Е.А., 98
Иванова О.П., 81
Иванцов М.И., 83
Иванчев С.С., 74
Иванчева Н.И., 74
Иванченко Г.С., 90
Ивичева С.Н., 84
Игнатов С.К., 41, 68, 107
Игнатова А.А., 133
Ильин А.В., 125
Ильина Е.В., 131
Ильина М.Н., 71
Иркабаева Э.А., 98
Исаакян А.Р., 65
Исаева Е.И., 70
Исаева Н.Ф., 61
Исмагилов З.Р., 51, 107
Исмаилов Э.Г., 42, 106
Истомин П.В., 75
Истомина Е.И., 75

Исупов В.П., 42

Й

Йонсон Э., 112

К

Кабальнова Н.Н., 77
Каграманов Н.Д., 71
Кадиров М.К., 116
Казак В.О., 84, 108
Казарян Р.К., 95
Калинин А.П., 85, 86
Калинина И.Г., 86
Калинкин А.В., 42, 120
Каргин Ю.Ф., 84
Кареев И.Е., 104
Карелин А.И., 86
Карпов О.Н., 70, 97
Касумов Ю.А., 36, 91
Кацур А.В., 88
Кашаева Е.А., 92, 111
Каюмов Р.Р., 87
Квашнина К.О., 61
Кенжсин Р.М., 66, 87,
88
Керженцев М.А., 51,
107
Кечекьян А.С., 45, 49,
74, 103
Кечекьян А.С., 43
Киверин А.Д., 29, 54
Ким В.П., 89
Кирсанкин А.А., 37, 88,
131
Киселёв В.Д., 92
Киселёв В.Д., 29, 92
Киселёв В.Д., 111
Киселёв В.Д., 111
Кислов В.М., 43, 88, 91
Кичигина Г.А., 75
Клапётке Т.М., 37
Клеменкова З.С., 71
Кленина И.Б., 112
Клецов А.А., 88

- Клименко И.В., 82
 Клямкина А.Н., 110, 127
 Кобзев Г.А., 83
 Ковалев Д.Ю., 43
 Ковалев И.Д., 43
 Ковалевский С.А., 35, 70
 Коваленко Е.А., 61
 Ковальчукова О.В., 89
 Коварский А.Л., 115
 Коверзанова Е.В., 70
 Ковтунов К.В., 33, 53
 Кожевин В.М., 43, 115
 Кожушнер М.А., 30, 131
 Козлова Е.А., 128
 Козлова Е.В., 45
 Козлова С.Г., 90, 103, 109
 Колбановский Ю.А., 122
 Колганова М.Н., 90
 Колесников Д.В., 90
 Колесникова Ю.Ю., 91
 Колесниченко Е.В., 50
 Колкер А.М., 69
 Колченко Н.Н., 37, 78, 88
 Колчина А.С., 91
 Комаров В.Н., 123
 Комендантов А.М., 114
 Комкова О.М., 110
 Коноваленко Д.П., 91
 Коновалихин С.В., 43
 Коновалов А.И., 29, 92, 111, 116
 Кононенко О.В., 36
 Константинов Г.И., 92
 Коптюг И.В., 33, 53
 Корнилов Д.А., 29, 92, 111
 Королев В.В., 120
 Корсунский Б.Л., 82
 Корчагин Д.В., 69
 Корчак В.Н., 72
 Костина Ю.В., 56
 Костров А.Н., 93
 Котенев А.В., 102
 Котина И.М., 124
 Кочервинский В.В., 93
 Кочетков Р.А., 44, 93
 Кочетов Н.А., 43, 93
 Кошевой Е.И., 44
 Кошкин А.В., 94, 97
 Коэмец Е.Г., 94
 Красильникова О.К., 100
 Краснов А.П., 64
 Крашенинников В.Г., 110, 127
 Крашенинников В.Г., 54, 70, 81, 104
 Крейкер А.А., 99
 Криворучко О.П., 69
 Криничная Е.П., 81
 Криничный В.И., 133
 Кротикова О.А., 50
 Кротова И.Н., 114, 115
 Круглов С.А., 44
 Крупкин В.Г., 49
 Крутойяров А.А., 94
 Кудашов А.Д., 95
 Кудинова О.И., 104
 Кузнецов М.С., 72
 Кузнецов Н.А., 59
 Кузнецова Р.Т., 63
 Кузнецова Я.А., 48
 Кузуб Л.И., 36
 Кузьменко Н.Е., 109
 Кузьмина Л.Г., 47
 Кулаковская С.И., 45
 Кулебякина А.И., 45
 Куликов А.В., 45, 81
 Куликова М.В., 83, 129
 Куприянов Л.Ю., 95
 Курганский С.И., 34
 Курдюмов С.С., 92
 Курина Л.Н., 103
 Куркин Т.С., 45, 49, 56, 74
 Куртикян Т.С., 95
 Кучкина И.О., 74
 Кушнарченко И.В., 48
 Л
 Лаврик Н.Л., 46, 95
 Лазарева Е.П., 99
 Лазарева Н.Л., 121
 Лайнер Ю.А., 122
 Ларионова Е.Ю., 72, 96
 Ларичкин В.В., 122
 Лебедев Н.Г., 46, 90, 121
 Лебедева Н.Ш., 69
 Лебедева О.С., 46
 Лебединский Ю.Ю., 93
 Левашов В.И., 36
 Левченко А.В., 86
 Левченко Л.А., 116
 Леднев С.Н., 119
 Леонова Л.С., 86
 Леонтьев В.Г., 115
 Летута А.С., 97
 Летута У.Г., 96
 Ли В.М., 70, 97, 127
 Лисицкий И.С., 72
 Литвин Я.А., 55
 Литвякова Н.Н., 99
 Лобанов А.В., 46
 Лобова Н.А., 47, 97
 Ловчиков В.А., 113, 114
 Логинова А.С., 107
 Логутенко О.А., 61
 Ложкин Б.А., 78
 Локтева Е.С., 115
 Ломакин С.М., 70
 Лопатина О.А., 70
 Лошадкин Д.В., 109, 119
 Луговский В.В., 36, 105
 Лукова Г.В., 29, 47

Лукша Р.С., 98
Лунин В.В., 108
Лупоносов Ю.Н., 60,
126
Лысова С.С., 98, 121
Любовская Р.Н., 81
Ляпкосова И.А., 46
Ляпунова М.В., 67, 98
Ляхов Н.З., 56, 61

М

Магаев О.В., 99
Магомедов Р.Н., 50
Маерле А.В., 63
Мажуга А.Г., 114
Маковийчук М.И., 47
Максименко О.О., 99
Максимов Ю.В., 92
Максимова М.Г., 73
Максимова О.Г., 29,
47, 59
Малахов С.Н., 66
Малиновская Ю.А., 99
Мальшев Н.С., 106
Мальков В.С., 67, 98
Мамонтов Г.В., 99
Мамыкин А.В., 100
Марголин А.Л., 102,
127
Маргулис А.Б., 118
Маркова Е.Б., 100
Марковская Д.В., 128
Мартьянов А.М., 74
Мастальгина Е.Е., 102
Масягутова Г.А., 100
Матвеев В.Н., 36
Матвеев Д.В., 36
Матиенко Л.И., 80
Матус Е.В., 51
Махаев В.Д., 100, 108
Мацько М.А., 33
Машковцев Р.И., 48
Медведев С.П., 29, 47,
59
Мееров Д.Б., 48

Мезенцева М.В., 70
Мелешко В.Ю., 51
Мельников В.П., 73, 77
Мельников П.В., 57
Мешкова И.Н., 73
Мещанкина М.Ю., 48,
101, 132
Микенас Т.Б., 44
Милов А.А., 47
Милов А.Д., 59
Милосердов П.А., 38, 49
Миль Е.М., 80
Минюкова Т.П., 130
Мирзаева Е.И., 61
Митряева Н.С., 101
Михайлик Е.С., 49
Михайлов А.И., 75, 88
Михайлова В.А., 61
Михалкин В.Н., 101
Мишаков И.В., 131
Мишина О.А., 116
Моделли А., 32
Моисеев И.И., 79
Мокрушин А.Д., 102
Молин А.А., 99
Молчанов С.П., 94
Монахова К.З., 103
Монахова Т.В., 70, 102,
127
Моногаров К.А., 48
Мороз Н.К., 103, 109
Морозова Т.А., 126
Москалева Е.Ю., 39
Москаленко И.В., 109
Московская Т.Э., 72
Мосягин Н.С., 56
Мохин Г.Н., 49
Муллоев Н.У., 46
Муравьев Н.В., 48
Мурадян В.Е., 110
Мурзин В.Ю., 59, 77, 92
Муртазина Л.И., 116,
118
Мусич П.Г., 103
Мустафина А.Р., 79

Мухина Е.В., 100
Мышлявцев А.В., 63,
101, 118

Н

Надточенко В.А., 93
Надуткин А.В., 75
Надхина С.Е., 86
Назимов Д.А., 120
Насуллаев Х.А., 61
Наумкин А.В., 64
Нафикова Е.П., 32
Невзорова Ю.В., 103
Неграшов И.В., 57
Недорезова П.М., 102,
110, 127
Нежный П.А., 104
Некрасов В.М., 104
Немухин А.В., 52
Несмелов Ю.Е., 57
Нестеренко Д.А., 78
Никашина В.А., 73
Никитин А.В., 50
Никитина Л.В., 71
Николаев А.Ю., 64
Николаев С.А., 76, 109,
114, 115
Николаева В.В., 105
Никулин П.А., 127
Никулина О.С., 105
Новиков В.Т., 111
Новиков Г.Ф., 74, 113
Новиков И.М., 80, 105
Новокионова Л.А., 54,
70, 81, 104

О

Овчаренко В.И., 33
Овчинников М.Ю., 50,
117
Овчинникова М.Я., 131
Озерин А.Н., 45, 49, 56,
74, 103
Озерин А.С., 50

- Озерин С.А., 50
 Озеров Г.К., 106
 Ольховская И.П., 91
 Орлов М.Ю., 106
 Орлов Ю.Д., 106, 123
 Османов Н.С., 106
 Османова С.Н., 106
 Остахов С.С., 100, 107
 Островский Г.М., 123
 Осыченко А.А., 93
 Охапкин А.И., 41, 107
 Охлопкова Л.Б., 51, 107
- П**
 Павлов А.С., 93
 Павловец Г.Я., 51
 Палько Н.Н., 79
 Пан Ю., 48
 Панин А.Н., 100
 Панкина Г.В., 84, 108
 Пантелеев С.В., 68
 Папков В.С., 71
 Пастернак Е.Н., 72
 Пахарукова В.П., 130
 Переславцева Н.С., 34
 Перчек В., 101
 Петров А.И., 132
 Петров А.Н., 56, 95, 108, 119
 Петров Н.В., 66
 Петров Н.Х., 94, 97
 Петрова Л.А., 100, 108
 Петрова Н.В., 89
 Петросян А.О., 65
 Петрушенко И.К., 133
 Пилипенко М.С., 94, 97
 Пичугина Д.А., 109
 Пичугина Е.С., 109
 Пищур Д.П., 103, 109
 Плахутин Б.Н., 30
 Плетнева И.В., 73
 Плисс Е.М., 51, 68, 110, 119
 Плисс Р.Е., 109
- Плюснин В.Ф., 52
 Погосян М.Дж., 129
 Погосян Н.М., 129
 Подлесный Д.Н., 110
 Поздняков И.П., 52
 Полианчик Е.В., 126
 Полунин К.Е., 124
 Полунина И.А., 124
 Польщиков С.В., 102, 110
 Поляев А.В., 44
 Поляков И.В., 52
 Полякова К.И., 105
 Пономарев В.И., 43
 Пономаренко С.А., 60, 126
 Попов А.А., 102
 Потапова Л.Н., 92, 111
 Поташова Н.И., 70, 97, 111
 Потемкин В.А., 79
 Похарукова Ю.Е., 111
 Прокофьев С.И., 112
 Пронкин П.Г., 90
 Просвирин И.П., 51
 Проскуряков И.И., 112
 Простнев А.С., 112
 Прохорова Ю.В., 76
 Пугачев В.М., 35
 Пургина Д.Д., 65, 112
 Пучков И.А., 99
 Пхъйо Мьинт У, 105
 Пчёлкин В.П., 113
 Пшеничнюк С.А., 32
 Пыцкий И.С., 124
- Р**
 Радченко Ф.С., 50
 Размыслов А.В., 88, 91
 Разуваев А.Г., 107
 Разумов В.Ф., 73
 Ракитин В.В., 74, 113
 Ракиа Е.В., 68
 Рахметова А.А., 91
 Рашидова С.Т., 98
 Редькина К.С., 90
- Рогачев А.Ю., 39
 Рогачева А.И., 39, 62
 Рогозина М.В., 52
 Родин В.М., 113, 114
 Родина А.В., 39
 Родионов А.И., 86
 Родионов И.Д., 85, 86
 Родионова И.П., 85
 Розенфельд М.А., 90
 Рольник Л.З., 77
 Романов А.Н., 72
 Романова И.А., 39
 Романова Л.Б., 78
 Ростовщикова Т.Н., 43, 114, 115
 Рубцов Н.М., 93
 Рудакова Т.А., 121
 Рудаковская П.Г., 114
 Румянцев Б.М., 115
 Русаков А.И., 109, 119
 Рывкина Н.Г., 104
 Рыжкин С.А., 116, 118
 Рыжкина И.С., 116, 118
 Рябов М.А., 89
- С**
 Савченко В.И., 50
 Садков А.П., 116
 Сажина Н.Н., 116
 Сазонов С.К., 117
 Саид-Галиев Е.Е., 64
 Сакун В.П., 131
 Салазкин С.Н., 71
 Салганская М.В., 88, 91
 Салганский Е.А., 43, 79, 91
 Салин А.В., 125
 Сальников О.Г., 53
 Сангинов Е.А., 87
 Санина Н.А., 69
 Сарвадий С.Ю., 117
 Сафаров Ф.Э., 50, 117
 Сафиуллин Р.А., 116

- Сафонов В.А., 128
 Саяпин Ю.А., 125
 Свалова А.И., 118
 Свиридова Л.Н., 45, 118
 Седловец Д.М., 113
 Селютин А.Г., 94
 Семенова И.В., 53, 66, 67
 Сеплярский Б.С., 44, 93
 Сергеев В.О., 58
 Сергеева С.Ю., 116, 118
 Серов С.А., 123
 Серов Ю.М., 100
 Сильников М.В., 47
 Сименцова И.И., 94, 119
 Сирик А.В., 119
 Скворцов И.А., 115
 Скитневская А.Д., 96
 Скоблин А.А., 55
 Скрипников Л.В., 56, 95, 108, 119
 Слуцкий В.Г., 58, 76
 Смирнов В.А., 54
 Смирнов В.Н., 55, 122
 Смирнов К.Л., 53
 Смирнов М.Ю., 42, 53, 120
 Смоленцев А.Б., 120
 Смыгалина А.Е., 54
 Соколов А.А., 58
 Соколов М.Н., 79
 Соловьева С.Е., 69
 Сорокина О.Н., 90
 Софич Д.О., 121
 Сошников Д.Ю., 72
 Спирин М.Г., 73
 Старикова Т.А., 98, 121
 Старчак Е.Е., 54
 Стенин В.Ф., 118
 Стенина Е.В., 45, 118
 Стищенко П.В., 118
 Стовбун С.В., 41, 55, 64
 Столяров И.П., 55
 Столярова В.П., 55
 Столярова Д.Ю., 67
 Стояновский О.В., 88
 Страшинова С.Б., 89
 Стрельцов Д.Р., 45, 71
 Судоргин С.А., 121
 Суетина И.А., 70
 Сукулова В.В., 33
 Сулимов В.Б., 72
 Султанбаев М.В., 107
 Сухов А.В., 121
 Сыченко Д.В., 122
- Т**
- Танашев Ю.Ю., 69
 Тарасов А.Г., 44
 Татарина Я.Е., 42
 Татиколов А.С., 90
 Телешев А.Т., 75
 Тенчурин Т.Х., 39
 Теплов О.А., 122
 Тереза А.М., 55, 122
 Терентьев А.В., 71
 Терзян А.М., 65
 Тикунова Е.П., 45, 56
 Титков А.И., 56, 61
 Титов А.В., 56, 95, 108, 119
 Титов В.Н., 116
 Титов С.В., 123
 Тихомирова М.А., 51
 Тихонов И.В., 68, 110
 Ткачев В.В., 125
 Ткачев Я.В., 57
 Ткачева Н.С., 86
 Товбин Ю.К., 30, 123
 Токтарев А.В., 120
 Толстиков С.Е., 33
 Тореева Н.А., 79
 Трахтенберг Л.И., 30
 Третьяков Е.В., 33
 Трофимов А.Б., 72
 Трофимов Б.А., 96
- Трубина С.В., 57, 61, 132
 Туровский Н.А., 68
 Туровцев В.В., 106, 123
 Тускаев В.А., 100
 Тухбатуллин А.А., 124
 Тухконен Л.М., 124
- У**
- Уваров В.И., 57, 64, 124
 Укше А.Е., 87
 Ульянов А.В., 124
 Усачев С.В., 70
 Утеньшев А.Н., 69, 125
 Уткин А.В., 62
 Ушаков Е.Н., 47
 Ушакова Т.М., 54
- Ф**
- Файнгольд Е.Е., 108
 Фаттахова З.Т., 72
 Фатхутдинов А.Р., 125
 Федин В.П., 79, 103
 Федин М.В., 33
 Федорова А.В., 77
 Федорова О.А., 120
 Федорова О.С., 59
 Федотов А.Б., 124
 Федотов А.С., 57, 64
 Феськов С.В., 41
 Фефелов В.Ф., 63
 Флакина А.М., 81
 Флид В.Р., 57, 126
 Фортон В.Е., 40
- Х**
- Хаджиев С.Н., 129
 Хаитов М.Р., 63
 Хаитов М.Р., 65, 112
 Халитова Л.Р., 77

- Харитонов В.А.*, 37, 58, 76, 117
Харламов А.А., 126
Харламов В.Ф., 58
Харламов Ф.В., 58
Хасин А.А., 119, 130
Ходос И.И., 36
Хомик С.В., 29, 47, 59, 101
Хомутов Г.Б., 89
Хомяков А.А., 91
Хурсан С.Л., 50, 107, 117
- Ц**
- Цветков В.Б.*, 72
Цветков М.В., 110, 126
Цветков Ю.Д., 59
Цивадзе А.Ю., 102
Цодиков М.В., 31, 57, 59, 64, 77, 79, 92, 124
Цыбуля С.В., 105
Цыдендамбаев В.Д., 113
- Ч**
- Чайкина Ю.А.*, 59, 131
Чапурина А.В., 127
Чащихин О.В., 111, 127
Чвалун С.Н., 39, 45, 48, 60, 66, 67, 71, 101, 126, 132
Чельцов В.Ф., 128
Червонный А.Д., 82
Черепанова С.В., 94, 119, 128
Чернавский П.А., 83, 84
Чернозатонский Л.А., 31
Черныш В.И., 112
Черняк А.В., 83
Чесноков В.В., 87, 131
Чибисов А.К., 117
- Чистяков А.В.*, 31, 59, 77, 79
Чмутин И.А., 104
Чоба М.А., 128
Чубунова Е.В., 93
Чудакова М.В., 77, 129
Чуканов Н.В., 82
Чумаков А.С., 89
Чураков А.В., 55
Чучелкин И.В., 36, 73, 129
- Ш**
- Шабатина Т.И.*, 60
Шамсиев Р.С., 57, 126
Шамсутдинова Ф.Г., 125
Шаповалова О.В., 129
Шарипов Г.Л., 124
Шахбазян А.К., 93
Шевченко В.Г., 110
Шершакова Н.Н., 65
Шестаков А.Ф., 60, 116, 130
Шилина М.И., 114
Шилов Г.В., 69
Шиловский И.П., 63
Шипуло Е.В., 99
Ширяев А.А., 80
Шкарин А.А., 111
Шмаков А.Н., 119
Шмыглева Л.В., 87
Штейнман А.А., 130
Штерцер Н.В., 130
Шуб Б.Р., 37, 58, 76, 78, 112, 117
Шувалова Н.И., 133
Шуваракова Е.И., 34, 87, 130, 131
Шульга Ю.М., 54
Шумаев В.Ю., 50, 117
Шумова В.В., 40
Шутилов Р.А., 40
Шушин А.И., 131
- Щ**
- Щеголихин А.Н.*, 55
Щербина М.А., 48, 60, 101, 126, 132
Щукарев А.В., 124
- Э**
- Эзжеленко Д.И.*, 114, 115
Эпинатьев И.Д., 132
Эренбург С.Б., 57, 61, 132
- Ю**
- Юданов В.В.*, 61
Юданова Е.И., 133
Юдина А.В., 133
Юнусов М.П., 61
Юрьев М.Ю., 133
Юрьева Е.А., 69
Юрьева Т.М., 130
Юсифов Ю.Г., 42
Юхаева Г.Р., 70
Юхвид В.И., 49
Юхин И.М., 61
Юхин Ю.М., 56, 57
- Я**
- Яблокова М.Ю.*, 56
Явсин Д.А., 43
Якушев В.В., 39, 62
Яржемский В.Г., 62
Яркова А.В., 111
Ярмоленко О.В., 62, 133
Ярославцев А.Б., 64
Яценко Д.А., 105