



ФИЦ ПХФ и МХ РАН - 2023



**Важнейшие результаты ФИЦ ПХФ и МХ РАН,
полученные в 2023 году**

**Доклад научного руководителя Центра
академика С.М. Алдошина**



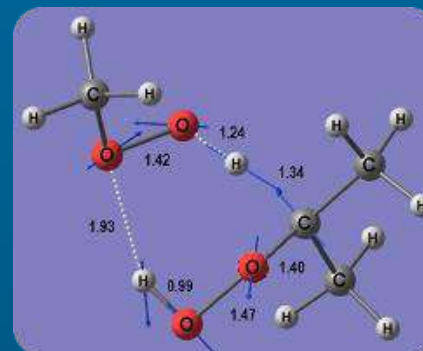
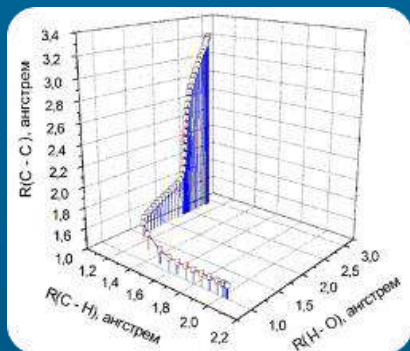
Структура научных исследований ФИЦ ПХФ и МХ РАН

Виды работ	Количество проектов
Государственное задание	27
Крупные научные проекты (100 млн)	5
Гранты Российского научного фонда	46
Центры компетенций НТИ	3
Мегагрант	1
Стипендии Президента РФ для поддержки молодых ученых – кандидатов наук	2
Научные договора	84
Гранты РФФИ	3
Гранты Минобрнауки	4

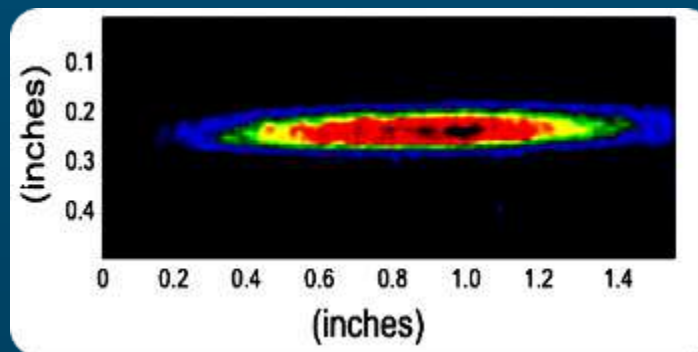
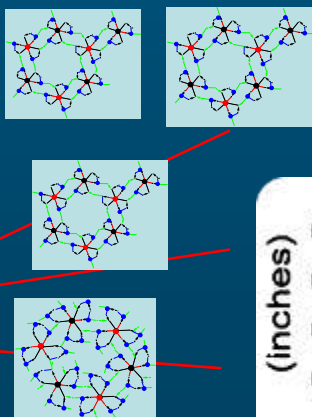
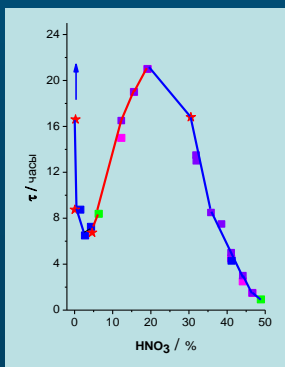




Фундаментальные основы химии



ПРИРОДА ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ, РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ И МЕХАНИЗМЫ РЕАКЦИИ ОСНОВНЫХ КЛАССОВ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

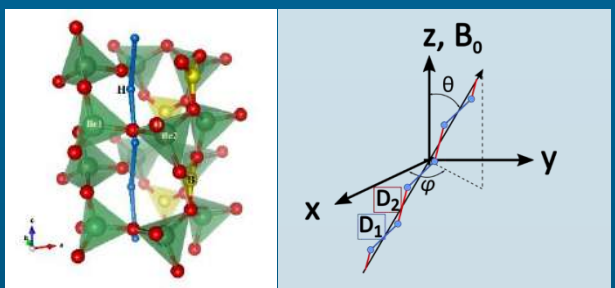




Многоквантовая динамика (МК) ЯМР в квазиодномерных альтернированных цепочках протонов кристалла гамбергита ($\text{Be}_2\text{VO}_3\text{OH}$)

Г.А. Бочкин¹, Э.Б. Фельдман¹, Д.П. Кирюхин², П.П. Куш², С.Г. Васильев³, К.В. Паничева³
 Лаборатория спиновой динамики и спинового компьютеринга (ТО¹), лаборатория криохимии и радиационной химии (ОСВ²), лаборатория ЯМР (АЦКП³)

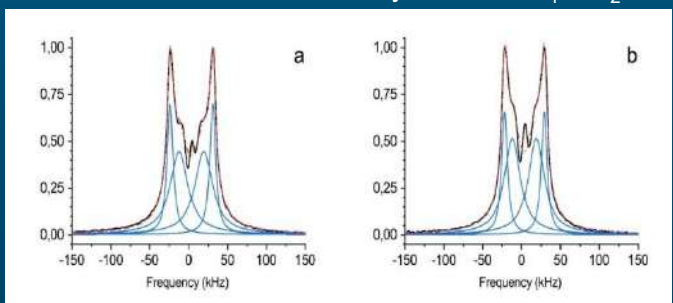
Зигзагообразная цепочка протонов в гамбергите во внешнем магнитном поле



$$D_1/D_2 = f(\phi, \theta)$$

¹H спектры гамбергита.

Расщепления компонент дублетов ~ D₁ и D₂



$$D_1/D_2 = 1.73$$

$$D_1/D_2 = 1.65$$

Была развита теория МК динамики ЯМР в альтернированных цепочках спинов с взаимодействием ближайших соседей. Эксперименты, проведенные на зигзагообразных цепочках протонов монокристалла гамбергита, продемонстрировали ожидаемое различие динамики при различных соотношениях констант диполь-дипольного взаимодействия соседей в альтернированной цепочке, которые были получены ориентированием кристалла во внешнем магнитном поле.

$$H_{MQ} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} D_{i,i+1} (I_i^+ I_{i+1}^- + I_i^- I_{i+1}^+)$$

$$J_0 = \frac{1}{N} \sum_k \cos^2(2\mu_k \tau)$$

$$J_{\pm 2} = \frac{1}{2N} \sum_k \sin^2(2\mu_k \tau)$$

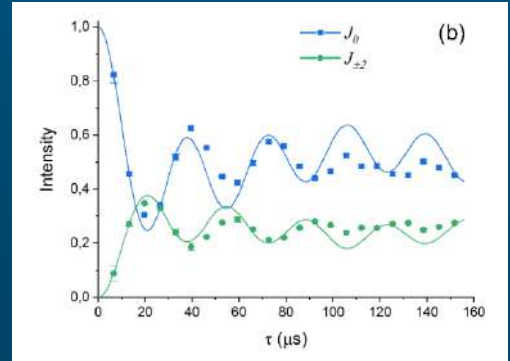
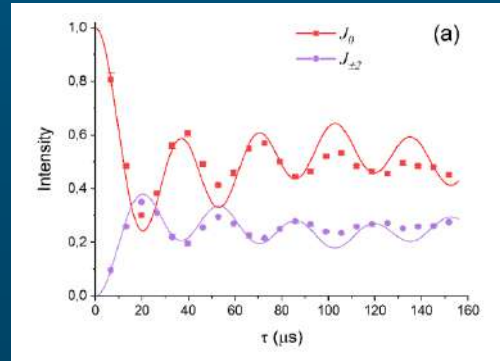
$$\mu_k = \frac{1}{2} \sqrt{D_1^2 + D_1 D_2 \cos \frac{2\pi k}{N+1} + D_2^2}$$

для $k = 1, 2, \dots, (N-1)/2$

$$\mu_k = -\frac{1}{2} \sqrt{D_1^2 + D_1 D_2 \cos \frac{2\pi k}{N+1} + D_2^2}$$

для $k = (N+3)/2, \dots, N-1, N$

Сравнение экспериментальных и теоретических зависимостей интенсивностей МК когерентностей от длительности их возбуждения



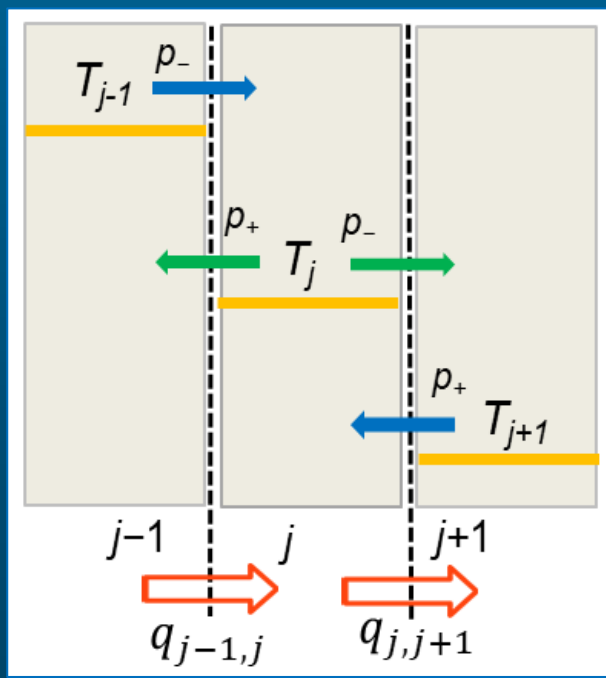


Дискретное уравнение теплопроводности: дисперсионный анализ и непрерывные пределы

С.Л. Соболев

Теоретический отдел, группа неравновесных процессов

Вывод: дискретная модель теплопереноса может быть использована на сверхкоротких пространственных (нано) и временных (пико и фемто) масштабах, когда традиционное континуальное описание не работает.



Модель дискретного процесса теплопереноса

Дискретное уравнение переноса

$$T(x, t + \tau) = \frac{1}{2}T(x - h, t) + \frac{1}{2}T(x + h, t)$$

Континуальные пределы

Классическое уравнение Фурье

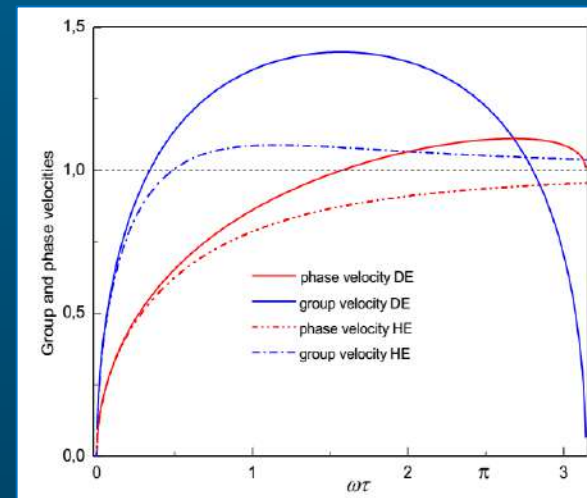
$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

гиперболическое уравнение переноса

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Дисперсионное соотношение

$$\exp(i\omega\tau) = \cos(kh)$$



Фазовые скорости как функции частоты

S. Sobolev, [SSRN Electronic Journal](http://ssrn.com/abstract=4548813), <http://ssrn.com/abstract=4548813>



Функции потенциальной энергии и дипольного момента основного электронного состояния нитрида фосфора

Э.С. Медведев, В.Г. Ушаков

Теоретический отдел

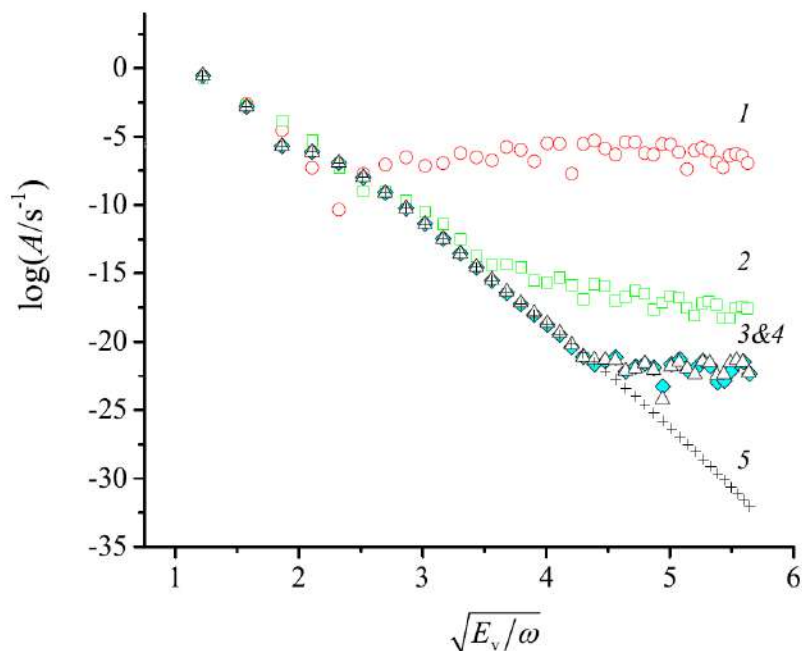


Рис. 1. Коэффициенты Эйнштейна обертоновых переходов $v=0$ $R(0)$. 1 – данные работы [1]. 2 – интерполяция DMF полиномом шестой степени (настоящая работа) и потенциал из [1]. 3, 4 – аналитические PEF и DMF (настоящая работа). 5 – расчет в комплексной плоскости, настоящая работа.

Расчеты интенсивностей спектральных линий без учета аналитических свойств используемых молекулярных функций приводят к ошибочным результатам. Аналогичные ошибки выявлены также для OH, YO, CaO, PS, NS, SH, PH, NO и т.д.

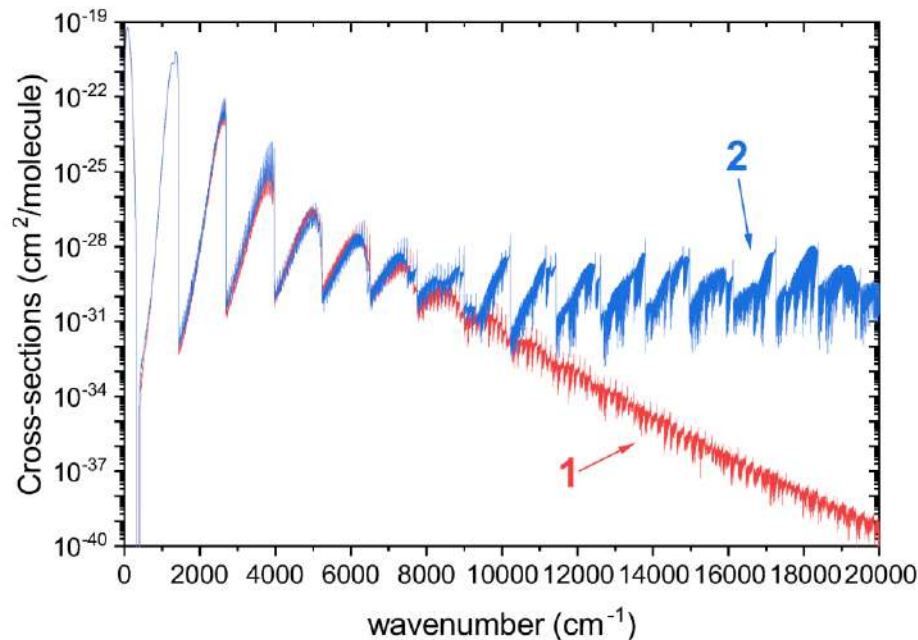
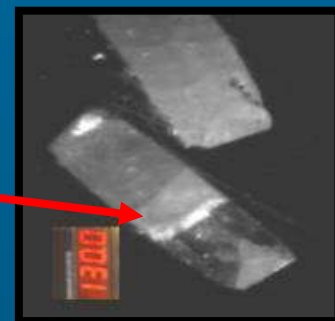
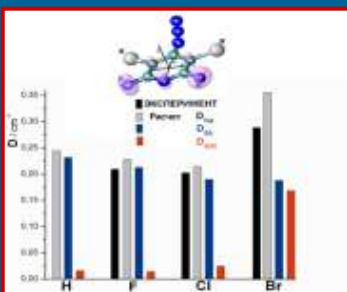


Рис. 4. Спектр поглощения нитрида фосфора при 2000 К. 1 – настоящая работа; 2 – результаты работы [1].

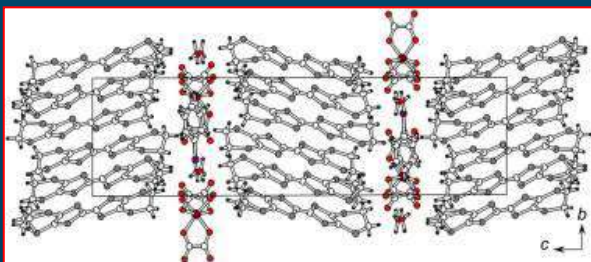
[1] L. Yorke, S. N. Yurchenko, L. Lodi, J. Tennyson, *ExoMol molecular line lists. VI. A high temperature line list for phosphorus nitride*, *MNRAS*, 445 (2014) 1383–1391

[2] V.G. Ushakov, M. Semenov, S.N. Yurchenko, A. Yu. Ermilov, E.S. Medvedev. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 2023, V. 395, 111804

Фундаментальные основы химии



СТРОЕНИЕ ТВЕРДЫХ ТЕЛ, ЖИДКОСТЕЙ И ГАЗОВ
РАЗЛИЧНОГО УРОВНЯ ОРГАНИЗАЦИИ, ОБНАРУЖЕНИЕ
И ИЗУЧЕНИЕ ЗАВИСИМОСТЕЙ
«СТРУКТУРА-СВОЙСТВО» С ЦЕЛЬЮ ПОЛУЧЕНИЯ
НОВЫХ, ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ЗНАНИЙ О ХИМИЧЕСКОЙ
СТРУКТУРЕ И СВОЙСТВАХ ВЕЩЕСТВ



Локально-неравновесное уравнение
диффузии ($t \sim \tau$, $L \sim l$)

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} = D \nabla^2 C$$

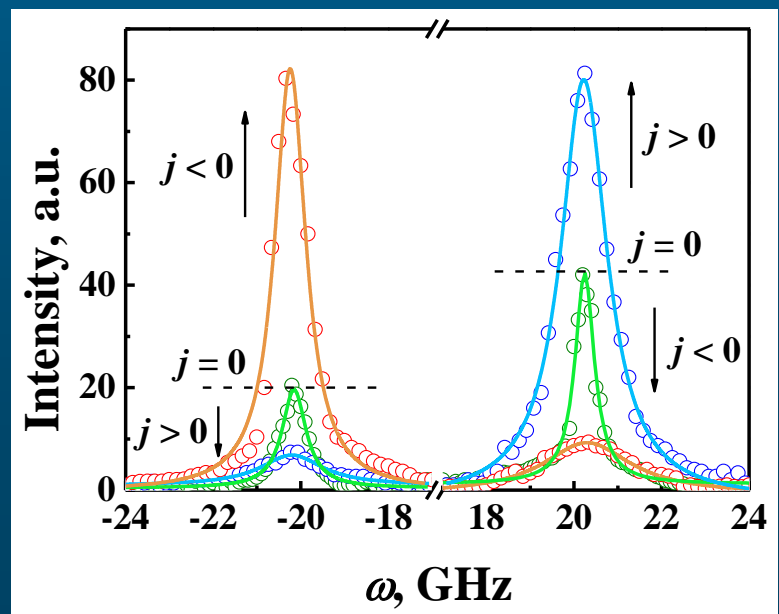
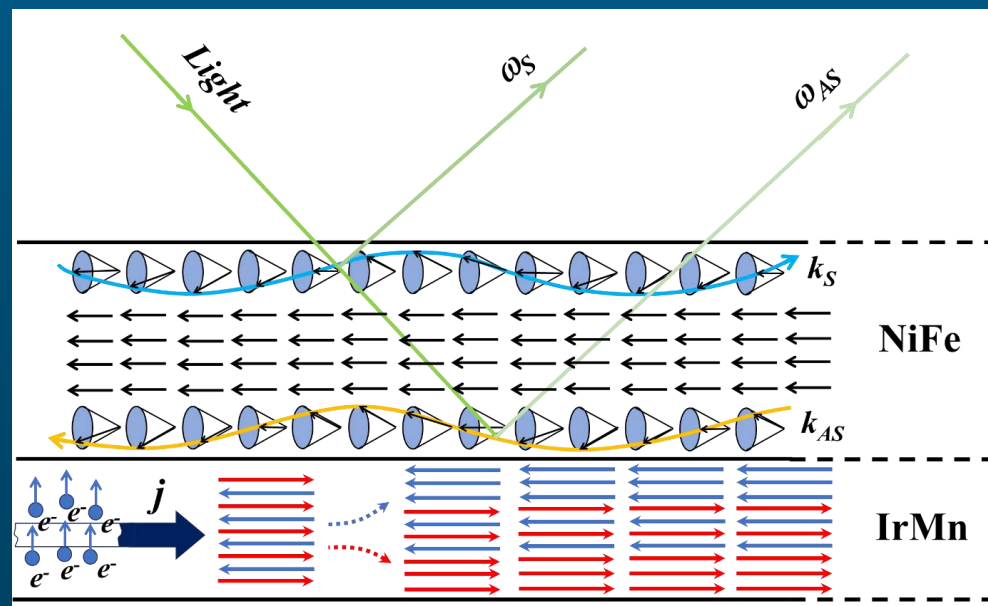


Управление частотой отраженного света с помощью СПИНОВОГО ТОКА

М. В. Бахметьев, Р. Б. Моргунов

ОСВ, группа магнитных и спиновых логических процессов и устройств

Обнаружено, что изменение ориентации одноосной анизотропии и соответствующей легкой оси обменного смещения под действием спинового тока (*Spin orbit torque, SOT*) в антиферромагнетике *IrMn*, влияет на динамику спиновых волн в соседнем ферромагнитном слое *NiFe*. Это выражается в перераспределении интенсивностей линий прямой (Стоксовой) и обратной (анти-Стоксовой) волны в спектрах Мандельштам-Бриллюэновского рассеяния света (BLS) на тепловых спиновых волнах при пропускании электрического тока через структуру *NiFe/IrMn*. При протекании тока вдоль магнитного поля подавляется Стоксова компонента на верхней части пленки *NiFe*, а при противоположных направлениях тока и поля подавляется анти-Стоксова компонента спектра, соответствующая обратной спиновой волне на нижней части пленки *NiFe*. Обнаруженный эффект свидетельствует о возможности управления спин-волновыми процессами в ферромагнетике при изменении магнитной анизотропии интерфейса *NiFe/IrMn* спиновым током. Это явление может быть использовано для создания электро-оптических приборов и перестройки частот лазеров.

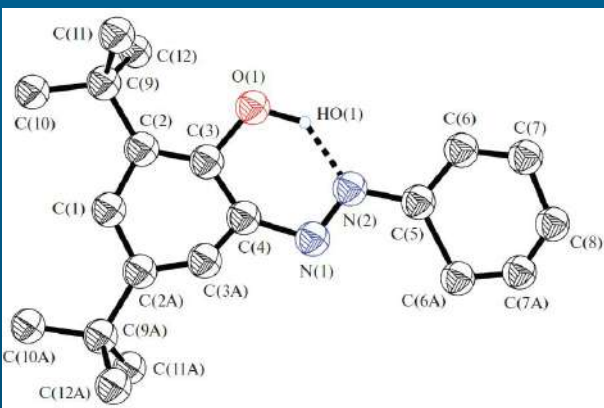


УДИВИТЕЛЬНЫЙ ПРИМЕР СОХРАНЕНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ 3,5-ДИТРЕТБУТИЛ-2-ГИДРОКСИАЗОБЕНЗОЛЬНОГО ЛИГАНДА ПРИ ОБРАЗОВАНИИ КОМПЛЕКСОВ Ni(II) И Pd(II)

С.М. Алдошин, В.В. Ткачев, А.Н. Утенышев, К.В. Боженко

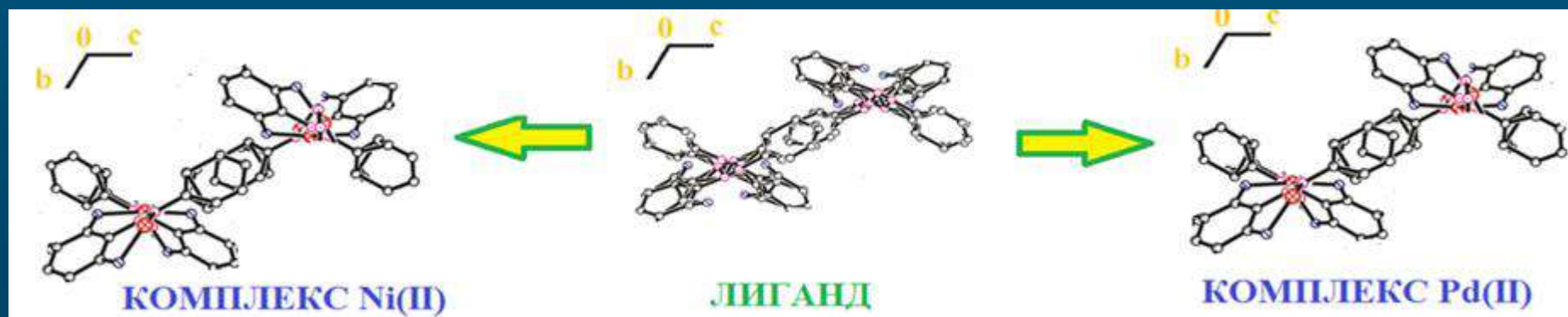
Отдел строения вещества, Лаборатория структурной химии

Методом рентгеноструктурного анализа установлено, что для 3,5-ди-третбутил-2-гидроксиазобензола (L) в свободном состоянии и в комплексах с катионами Ni²⁺ (I) и Pd²⁺ (II) реализуется одна и та же пространственная группа «R-3c» с близкими значениями параметров элементарной ячейки, одинаковым мотивом кристаллической структуры, и необычной конформацией координационного полиэдра I и II в виде «купола».



Основные кристаллографические параметры для кристаллов соединений L, I, II

Параметр	Значение		
	L	I	II
Брутто-формула	C ₂₀ H ₂₆ N ₂ O	C ₄₀ H ₅₀ N ₄ O ₂ Ni	C ₄₀ H ₅₀ N ₄ O ₂ Pd
<i>M</i>	310.43	677.55	725.27
Сингония, пр. группа	Гексагональная, $R\bar{3}c$		
Параметры ячейки	$a = 23.626(3) \text{ \AA}, \alpha = 90^\circ$ $b = 23.626(3) \text{ \AA}, \beta = 90^\circ$ $c = 17.561(4) \text{ \AA}, \gamma = 120^\circ$	$a = 23.770(3) \text{ \AA}, \alpha = 90^\circ$ $b = 23.770(3) \text{ \AA}, \beta = 90^\circ$ $c = 17.224(4) \text{ \AA}, \gamma = 120^\circ$	$a = 23.806(6) \text{ \AA}, \alpha = 90^\circ$ $b = 23.806(6) \text{ \AA}, \beta = 90^\circ$ $c = 17.330(3) \text{ \AA}, \gamma = 120^\circ$
Объем ячейки, \AA^3	8489(2)	8428(3)	8506(3)
<i>Z</i> ; плотность, г/см ³	18; 1.093	18; 1.221	18; 1.271



С.М. Алдошин, В.В. Ткачев, А.Н. Утенышев, К.В. Боженко. // *Координационная химия*, 2023. Т. 49. № 5, с. 308-314.

Работа проводилась в рамках темкарты АААА-А19-119092390076



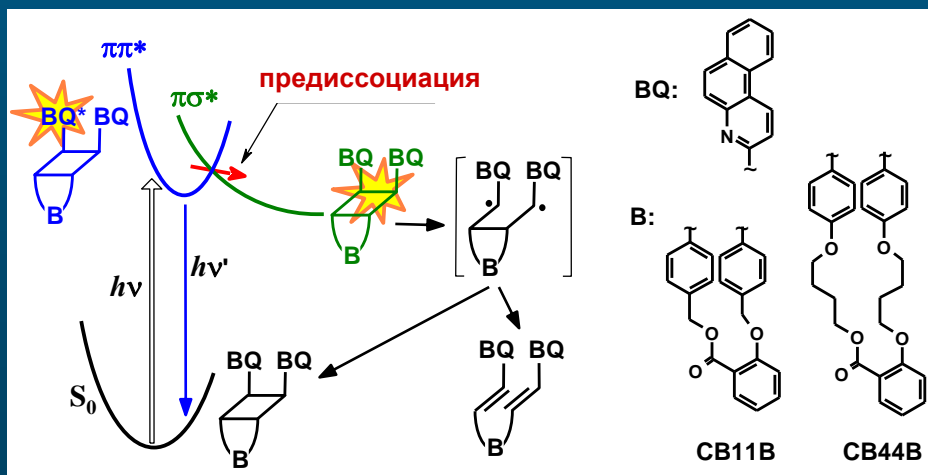
Влияние дистальных заместителей на фотоиндуцированное раскрытие циклобутана

М.Ф. Будыка, В.М. Ли, Т.Н. Гавришова, С.А. Товстун

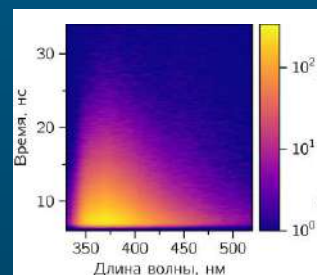
Отдел нанофотоники

На примере двух родственных циклобутанов, СВ11В и СВ44В, имеющих одинаковые вицинальные бензохинолиновые заместители у одной С-С связи четырехчленного кольца, но разные дистальные заместители у противоположной С-С связи, найдено, что квантовый выход реакции раскрытия циклобутана зависит от структуры дистальных заместителей, несмотря на их удаленность от реакционного центра. Для фотоиндуцированного раскрытия циклобутана нами предложен механизм преддиссоциации, согласно которому на первой стадии реакции происходит перенос энергии от возбужденного бензохинолина на циклобутановую С-С связь, что соответствует переходу системы со связывающего $\pi\pi^*$ -терма на диссоциативный $\pi\sigma^*$ -терм. Показано, что дистальный заместитель влияет на квантовый выход переноса энергии. Выяснение природы этого эффекта требует дальнейших исследований.

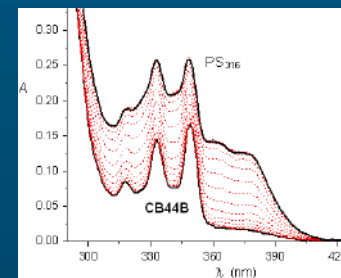
Механизм фотоиндуцированного раскрытия циклобутана



Время-разрешенные спектры флуоресценции СВ11В



Спектральные изменения при фотолизе СВ44В



Циклобутан	Квантовый выход	
	переноса энергии	раскрытия циклобутана
СВ11В	0.47	0.09
СВ44В	0.6	0.17



Первый парамагнитный анионный координационно-связанный димер $\text{Fe}_2\text{C}_{120}$, связанный мостиковыми атомами железа и двумя С-С связями

Д.В. Конарев, П.А. Соболев, А.Ф. Шестаков

Отдел Кинетики и Катализа, Лаборатория перспективных полифункциональных материалов.

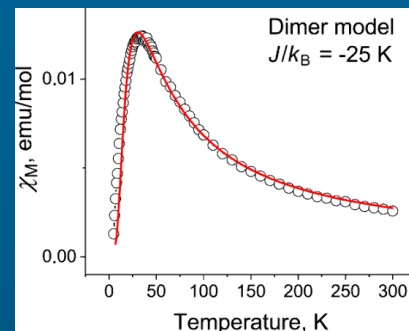
В анионном парамагнитном координационно-связанном димере $\{[\text{Fe}(\text{CO})_2]_2 \cdot \mu_2\text{-}\eta^2\text{:}\eta^2\text{-}\eta^2\text{-}(\text{C}_{120})\}^{2-}$, отрицательный заряд распределен по всей системе, тогда как спиновая плотность локализована в основном на атомах Fe.

В димере выше 30 К реализуется синглет–триплетный переход

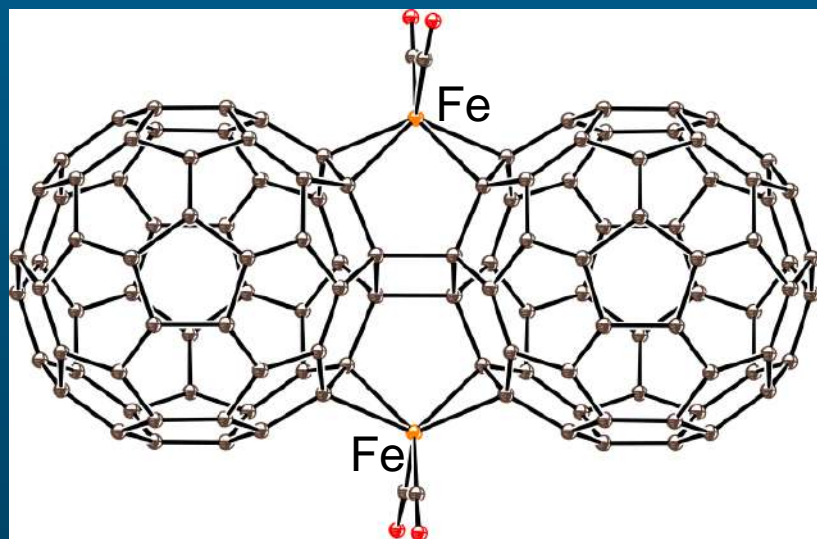
Получен при взаимодействии соли {Криптандин(K^+)}($\text{C}_{60}^{\bullet-}$) с карбонилем $\text{Fe}_3(\text{CO})_{12}$.

В аналогичной реакции с карбонилем $\text{Fe}(\text{CO})_5$ ранее был получен изомерный диамагнитный комплекс со связью Fe-Fe, в котором атомы Fe

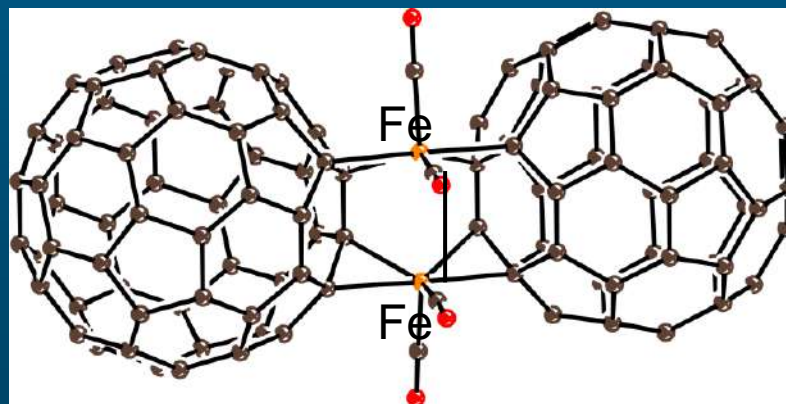
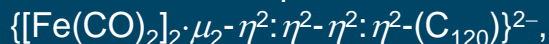
также являются мостиковыми между C_{60} лигандами



Синглет-триплетный переход с $J/k_B = -25$ К.



Строение анионного парамагнитного димера:

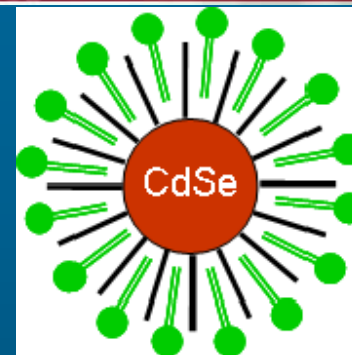
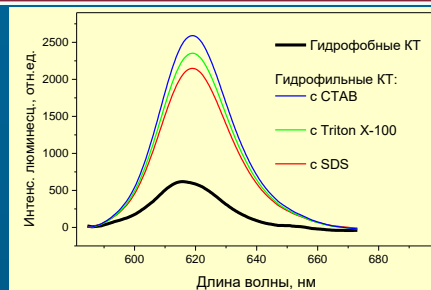
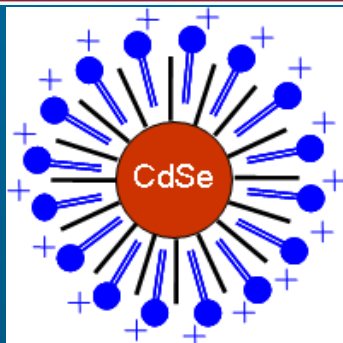


Строение изомерного диамагнитного димера: $\{\text{Fe}(\text{CO})_2 \cdot \mu_2\text{-}\eta^2, \eta^2\text{-}\text{C}_{60}\}_2^{2-}$

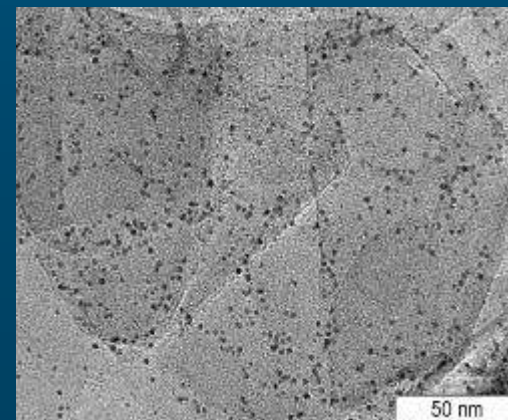
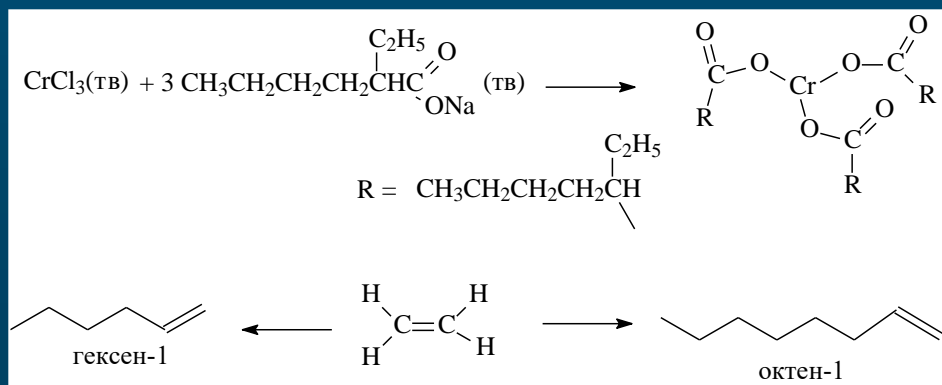
P. A. Sobov, A. V. Kuzmin, S. S. Khasanov, A. F. Shestakov, A. Otsuka, H. Yamochi, H. Kitagawa, D. V. Konarev, *Inorg. Chem.* 2023, **62**, 17736 (Q1).

Работа проводилась в рамках РНФ N 21-13-00221 и темкарты АААА-А19-119092390079-8.у

Фундаментальные основы химии



МЕТОДОЛОГИЯ СИНТЕЗА НОВЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ, ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ, НЕОРГАНИЧЕСКИХ И ПОЛИМЕРНЫХ ВЕЩЕСТВ, СОЗДАНИЕ НОВЫХ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

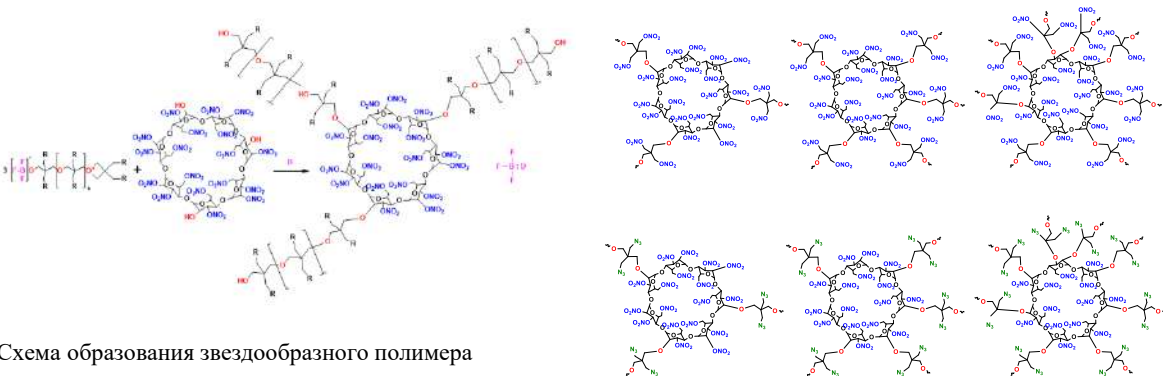
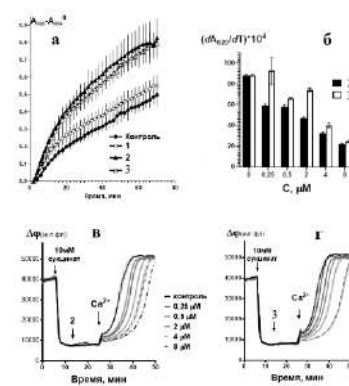
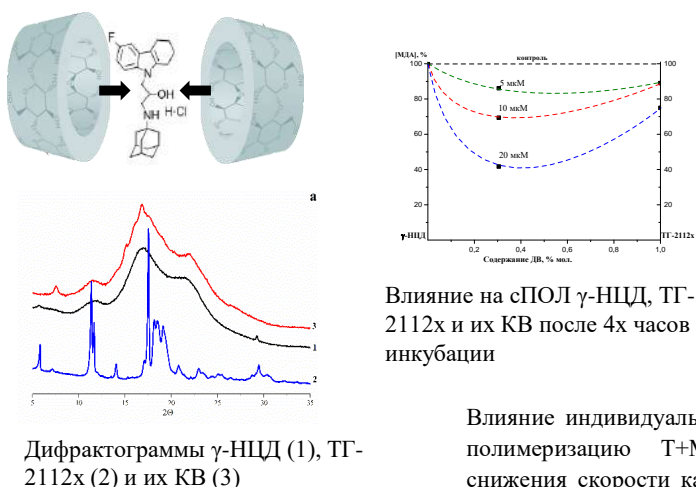
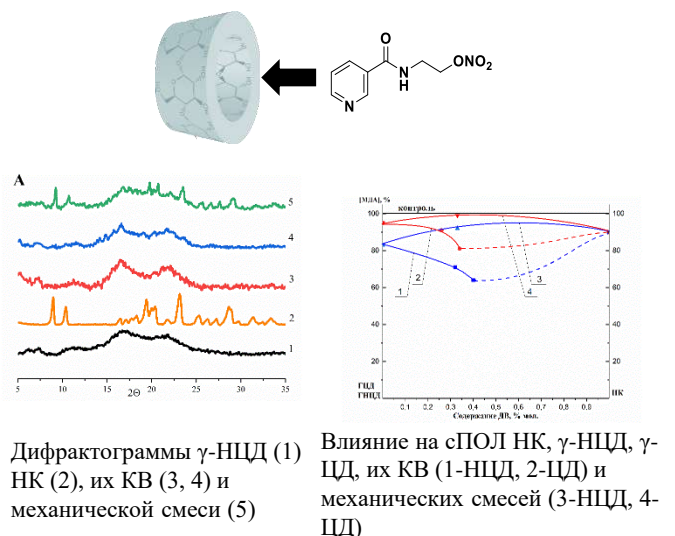


Перспективы использования нитратов циклодекстринов

Михайлов Ю.М., Даровских А.В. (ОГВ),

Файнгольд И.И., Климанова Е.Н.(ОКХиБП), Бачурин С.О., Шевцова Е.Ф., Мальцев А.В. (ИФАВ),
Бадамшина Э.Р., Тарасов А.Е. (ОПиКМ)

Показана возможность использования нитратов циклодекстринов как веществ двойного назначения: в качестве потенциальных носителей лекарственных препаратов в виде комплексов включения с физиологически активными веществами и в качестве основы для создания новых энергетических звездообразных полимеров.



Энтальпия образования и нижние пределы чувствительности к механическим воздействиям звездообразных полимеров

Название	Брутто-формула	Нижний предел чувствительности		ΔH , кДж/кг
		Удар Дж	Трение, МПа	
НЦД 3	$C_{41}H_{51}N_{18}O_{21}$	5	240	-2870
НЦД 5	$C_{41}H_{51}N_{18}O_{27}$	5	300	-3220
НЦД 8	$C_{47}H_{57}N_{13}O_{31}$	15	500	-3700
полиБАМО	$[C_{24}H_{28}N_6O]_{15.7}$	10	600	2635
ЗП НЦД БАМО 3	$C_{42}H_{52}N_{18}O_{21} * 3[C_6H_8N_2O]_{26.5}$	10	550	1800
ЗП НЦД БАМО 5	$C_{41}H_{51}N_{18}O_{27} * 5[C_6H_8N_2O]_{25.9}$	15	600	2845
ЗП НЦД БАМО 8	$C_{47}H_{57}N_{13}O_{31} * 8[C_6H_8N_2O]_{31.3}$	15	800	3600
полиБНО	$[C_8H_8N_2O]_{36.5}$	15	700	-2680
ЗП НЦД БМО 3	$C_{42}H_{52}N_{18}O_{21} * 3[C_8H_8N_2O]_{12.1}$	15	500	-1440
ЗП НЦД БМО 5	$C_{41}H_{51}N_{18}O_{27} * 5[C_8H_8N_2O]_{15.7}$	15	500	-1300
ЗП НЦД БМО 8	$C_{47}H_{57}N_{13}O_{31} * 8[C_8H_8N_2O]_{11}$	20	600	-1200



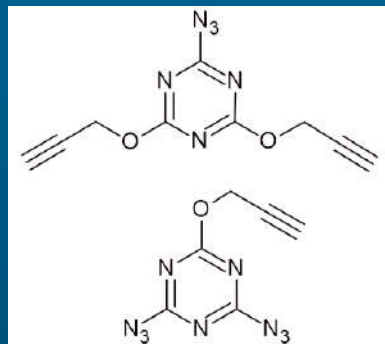
Применение метода сверхбыстрой нанокалориметрии на чипе для исследования фазового состояния и топохимических процессов в энергоемких триазиновых мономерах

Д.А.Иванов, Е.В. Комов, Д.В. Анохин, А.О. Петров

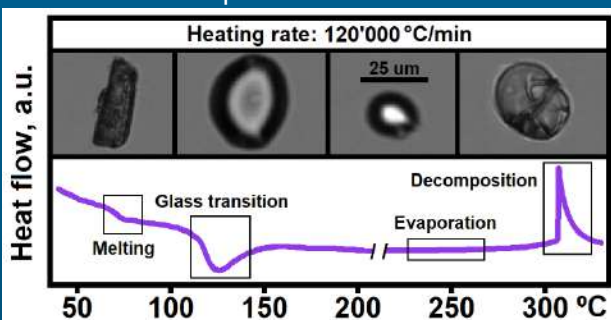
Отдел полимеров и композиционных материалов,
Лаборатория перспективных материалов для биомедицины и энергетики

Методом сверхбыстрой калориметрии на чипе были получены данные о фазовом поведении триазиновых мономеров. Охарактеризованы процессы олигомеризации, полимеризации, плавления и термического разложения, изучено влияние старения на степень кристалличности и способность к полимеризации таких систем.

Исследуемые системы



Фазовое поведение, нанокалориметрия и оптическая микроскопия



Кинетика процесса, уточненное двухстадийное уравнение Аврами

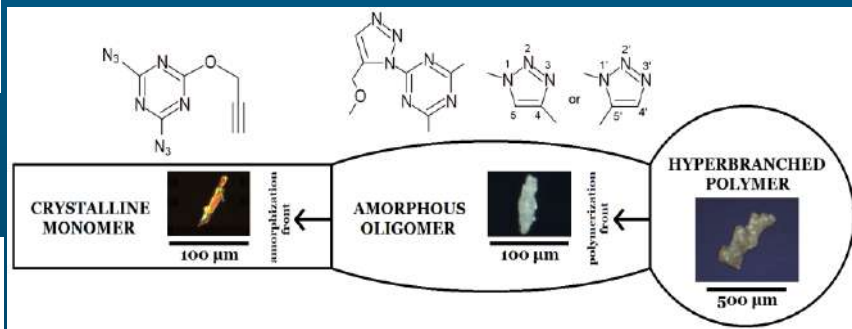
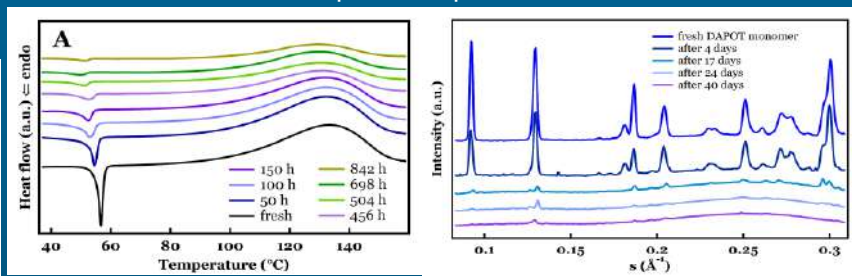
$$\alpha_{am}(t) = 1 - \exp(-K_1(t - t_0)^{n_1})$$

$$\alpha_{pol}(t) = \int_{t_0}^t \alpha_{pol}(t - \theta) \times \frac{d}{d\theta} (\alpha_{am}(\theta)) d\theta,$$

$$\alpha_{pol}(t) = K_1 n_1 \int_{t_0}^t [1 - \exp(-K_2(t - \theta)^{n_2})] \times (\theta - t_0)^{n_1 - 1} \exp(-K_1(\theta - t_0)^{n_1}) d\theta,$$

Для систем, обладающих сложной кинетикой полимеризации, было получено уточненное двухстадийное уравнение Аврами, учитывающее как олигомеризацию, так и неотрывно следующую за ней полимеризацию. Впервые экспериментально разделены эти два процесса при помощи метода нанокалориметрии.

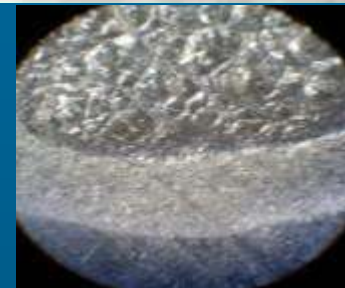
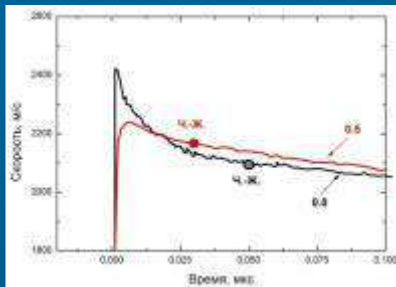
Старение образцов



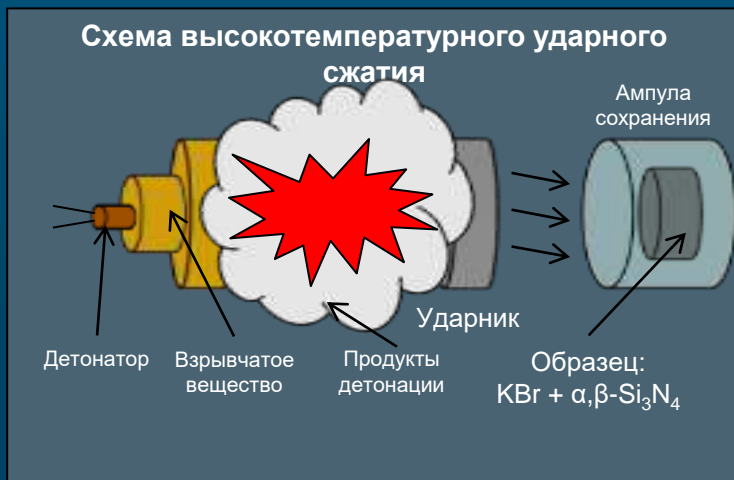
Публикация: Evgenii V. Komov, Alexey P. Melnikov, Alexey A. Piryazev, Alina V. Maryasevskaya, Artyom O. Petrov, Georgiy V. Malkov, Alexey V. Shastin, Denis V. Anokhin, Dimitri A. Ivanov,, **Thermochimica Acta**, Volume 728, 2023, 179577, ISSN 0040-6031. (Q2)



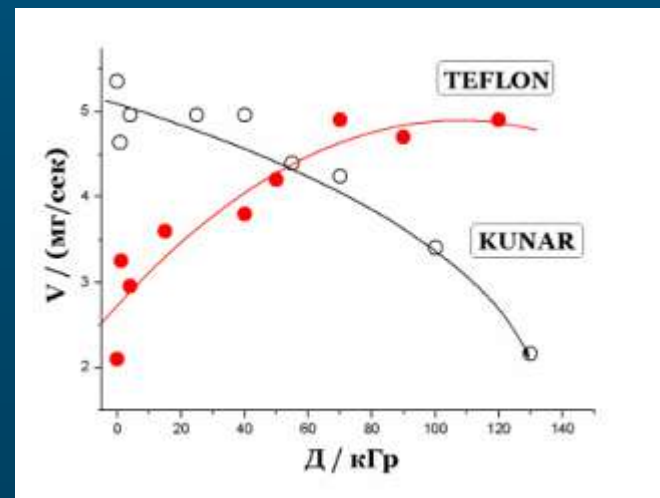
Фундаментальные основы химии



ВЛИЯНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ (ДАВЛЕНИЕ, ТЕМПЕРАТУРА, ТЕПЛО- И МАССОПЕРЕНОС, ИЗЛУЧЕНИЕ И Т.Д.) НА ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПРОТЕКАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ



Нагрев вещества происходит за счёт сильного сжатия добавки – KBr с высокой сжимаемостью



Исследование ударно-волновых свойств керамики «Идеал»

Шевченко В.Я., Орыщенко А.С., Лепин В.Н., Лушников А.В., Алдошин С.М., Перевислов С.Н., Ломоносов И.В., Савиных А.С., Гаркушин Г.В., Разоренов С.В., Мочалова В.М., Уткин А.В., Николаев Д.Н., Минцев В.Б.

ФИЦ ПХФ и МХ РАН, НИЦ «Курчатовский институт», АО «Концерн Калашников»

• Впервые при экстремальных давлениях исследована новая керамика «Идеал», композит алмаз – карбид кремния. Найден динамический предел упругости, определяемый свойствами карбида кремния, равный 13,4 ГПа. Проведены измерения откольной прочности в области упругого деформирования (1.1 – 1.4 ГПа). Определена ударная сжимаемость керамики до давления 625 ГПа. Показано, что до давления 135 ГПа алмазная фаза остаётся в упругом состоянии, поэтому керамика «Идеал» является перспективным материалом для защиты от высокоскоростных воздействий

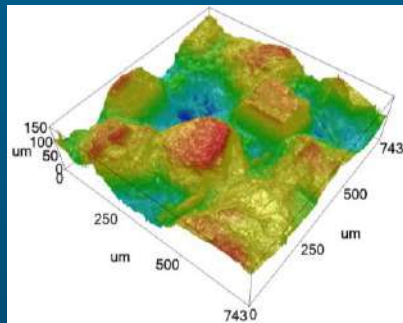


Рис.1. 3-D визуализация поверхности керамики «Идеал».

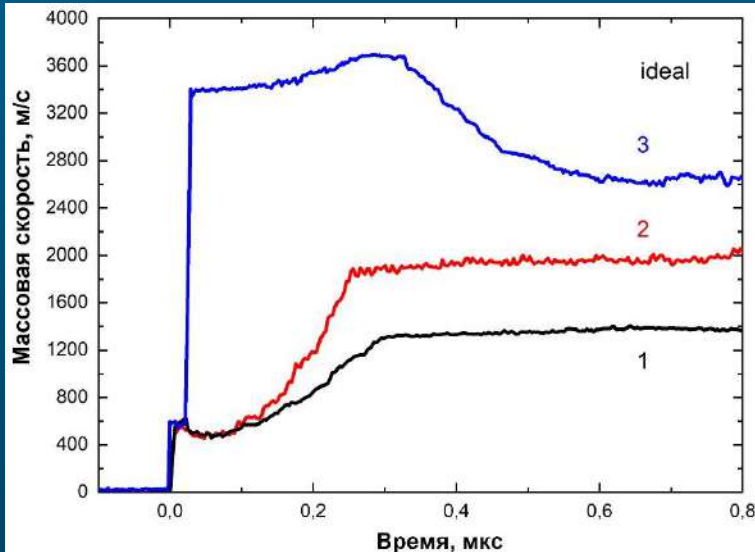


Рис.2. Профили массовой скорости на границе «Идеал»/вода при различных амплитудах ударных волн (1 - 34 ГПа, 2 - 50 ГПа, 3 - 85 ГПа).

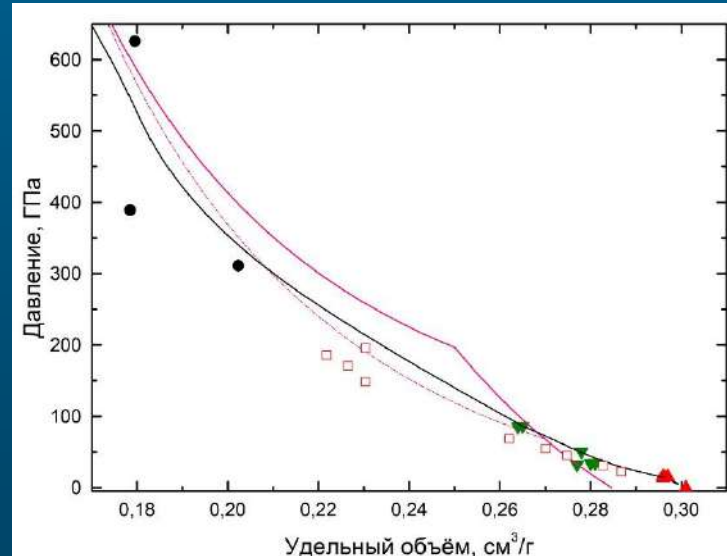


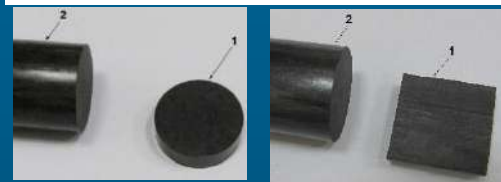
Рис.3. Ударные адиабаты «Идеала» (черные, красные и зеленые точки) и алмаза при различном размере частиц (розовые линии).

Исследование ударно-волновых свойств однонаправленного углепластика

Мочалова В.М., Николаев Д.Н., Уткин А.В., Минцев В.Б., Ломоносов И.В.

Отдел экстремальных состояний вещества ФИЦ ПХФ и МХ РАН

• Определены ударно-волновые свойства композита на основе однонаправленных углеродных волокон и его матрицы – эпоксидной смолы – до 200 ГПа. Показано, что ударная адиабата углепластика не зависит от ориентации волокон и при 23 ГПа ней регистрируется особенность, обусловленная фазовым переходом графит/алмаз. Откольная прочность композита в зависимости от ориентации волокон изменяется от 0.07 до 0.42 ГПа.



Однонаправленный углепластик: 2-заготовка, 1-образцы с продольной и поперечной ориентацией волокон

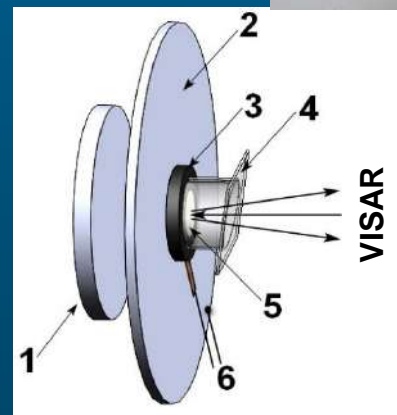


Схема эксперимента:

1 – ударник; 2 – экран; 3 – образец; 4 – водяное окно; 5 – Al фольга; 6 – датчик.

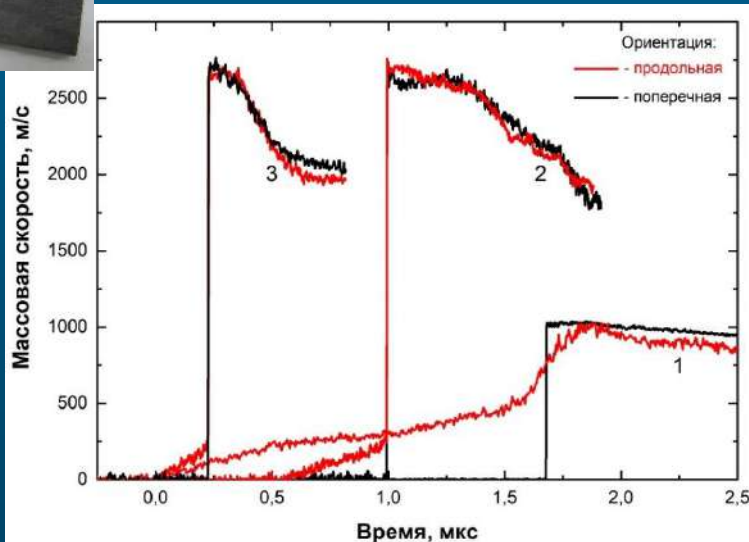


Рис.1. Волновые профили в углепластике при различных амплитудах ударных волн (1 – 4.6 ГПа, 2 - 20 ГПа, 3 - 25 ГПа).

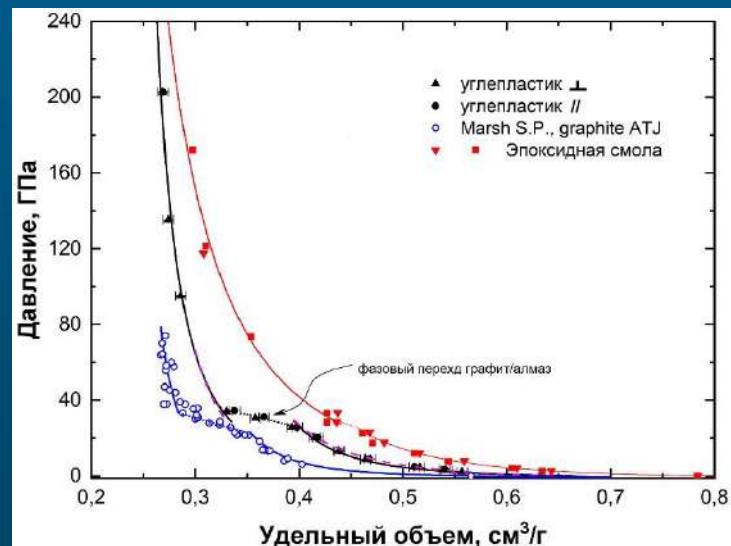


Рис.2. Ударные адиабаты углепластика (черные точки), эпоксидной смолы (красный) и углерода (синий).

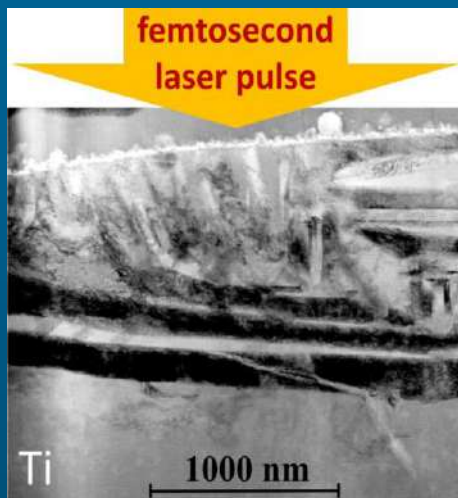
Индукцированный воздействием лазерных импульсов ультракороткой (фемтосекундной) длительности механизм ударного плавления и перераспределения компонентов в сплавах.

Ю.Р. Колобов¹, И.В. Неласов¹, С.С. Манохин¹, А.Р. Токмачёва-Колобова¹, В.В. Жаховский², Н.А. Иногамов³, С.Л. Соболев¹, С.И. Ашитков⁴

¹ ФИЦ ПХФ и МХ, ²ВНИИА им. Н. Л. Духова, ³ИТФ им. Л.Д. Ландау, ⁴ОИВТ РАН

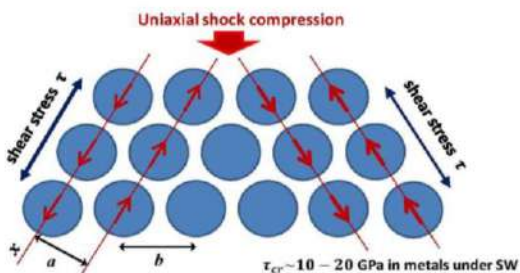
Химико-технологический отдел, лаборатория физико-химической инженерии композиционных материалов

На примере титана установлен физический механизм и обоснована модель обнаруженного ранее авторами эффекта «холодного» ударного плавления металлической матрицы, проявляющегося при воздействии лазерными импульсами фемтосекундной длительности.



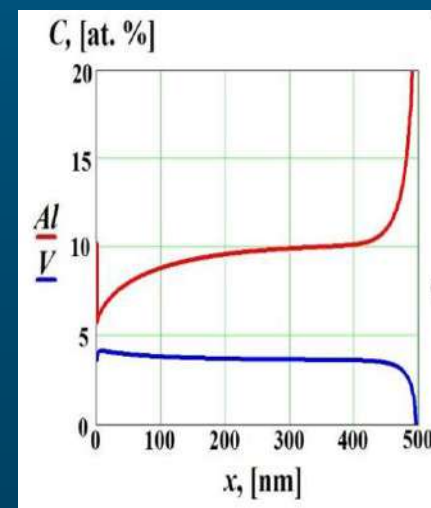
Для многокомпонентных расплавов построена математическая модель перераспределения компонентов при кристаллизации. Модель учитывает локальные неравновесные и перекрестные диффузионные процессы в жидкой фазе, позволяет определить распределение компонентов процессе и после затвердевания.

Frenkel critical shear stress for free slip



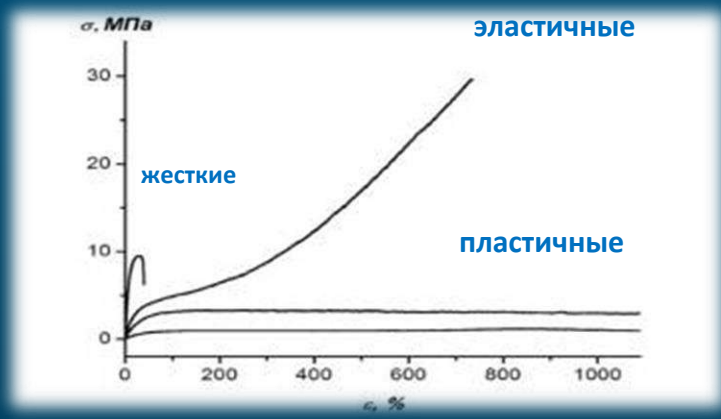
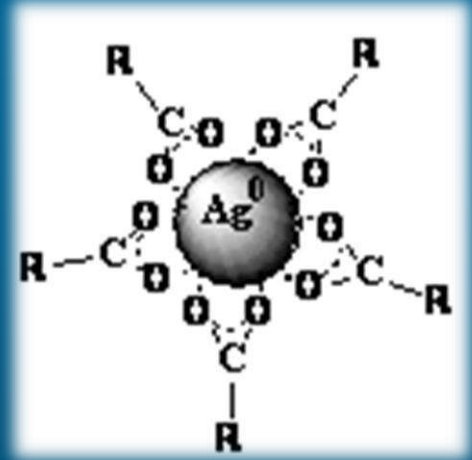
- $\tau = \frac{Gb}{2\pi a} \sin \frac{2\pi x}{b}$ - applied shear stress between slipping atom planes
- Maximal $\tau_{cr} = \frac{Gb}{2\pi a} \sim \frac{G}{2\pi}$ is required to drive the free slip (Frenkel, 1926).
- Family of intersecting slip planes => Free slip in several directions = liquid

- **Physics of Fluids**. 2023, V.35, №9 p. 096104, **Q1**, Impact factor: 4.6;
- **Computational Materials Science**. – 2023. – Т. 216. – p. 111841. **Q1**, Impact factor: 3.572
- **Optical and Quantum Electronics**. – 2023, V. 55. – № 9 (775), **Q1**, Impact factor: 4.939
- **Computational Materials Science** – 2023 – Vol. 228 – 112284, **Q1**, Impact factor: 3.572.
- **Materials**. – 2023. – Т. 16. – №. 4. – p. 1622. **Q2**, Impact factor: 3.748.





НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ СОЗДАНИЯ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ С ЗАДАННЫМИ СВОЙСТВАМИ И ФУНКЦИЯМИ, В ТОМ ЧИСЛЕ ВЫСОКОЧИСТЫХ И НАНОМАТЕРИАЛОВ

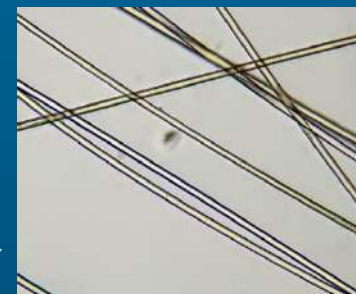
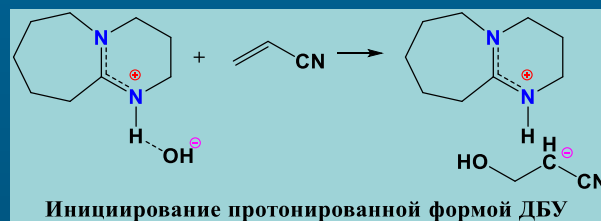
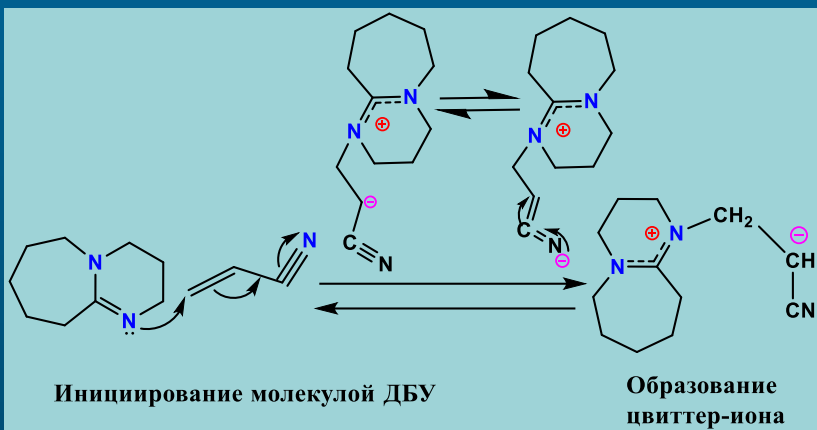


Иницирование анионной полимеризации акрилонитрила под действием 1,8-диазабцикло-[5.4.0]-ундецена-7

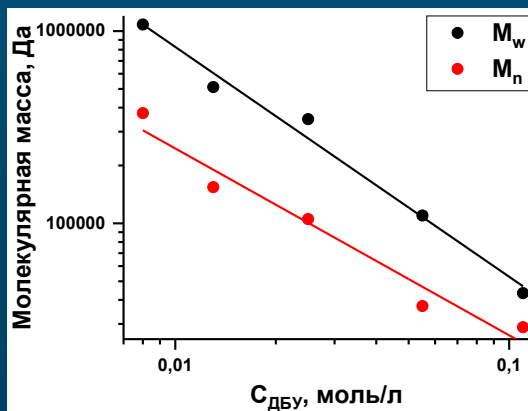
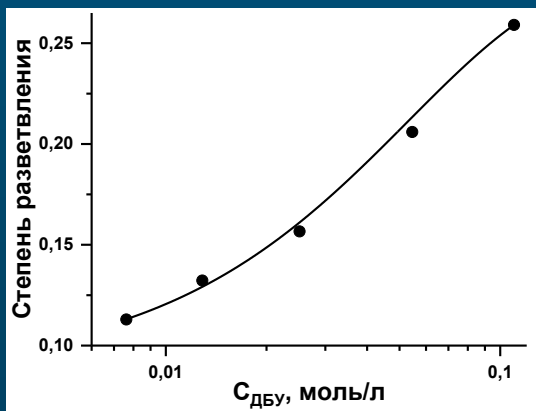
А.Е. Тарасов, Ю.В. Подвальная, А.А. Грищук, А.А. Ершов, Э.Р. Бадамшина

Отдел полимеров и композиционных материалов, Лаборатория специальных полимеров

Установлен механизм иницирования анионной полимеризации акрилонитрила под действием однокомпонентного инициатора 1,8-диазабцикло-[5.4.0]-ундецена-7, позволяющего в мягких условиях без тщательной осушки реагентов получать линейный полиакрилонитрил с регулируемой молекулярной массой – прекурсор углеволокна. Область практических приложений: композиционные материалы, углеволокно



Фотография волокна ПАН (механотропное формование, ИНХС РАН, ширина кадра 852 мкм)



Образец **ПАН ДБУ** ПАН GF

M _n	170000	80000
Прочность, Мпа	600	600-700
Удлинение, %	11±2	20
Модуль, ГПа	19	10-15

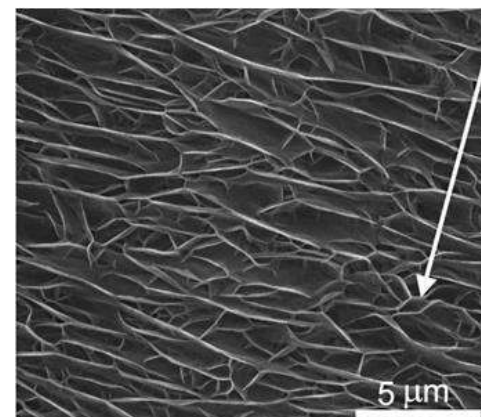
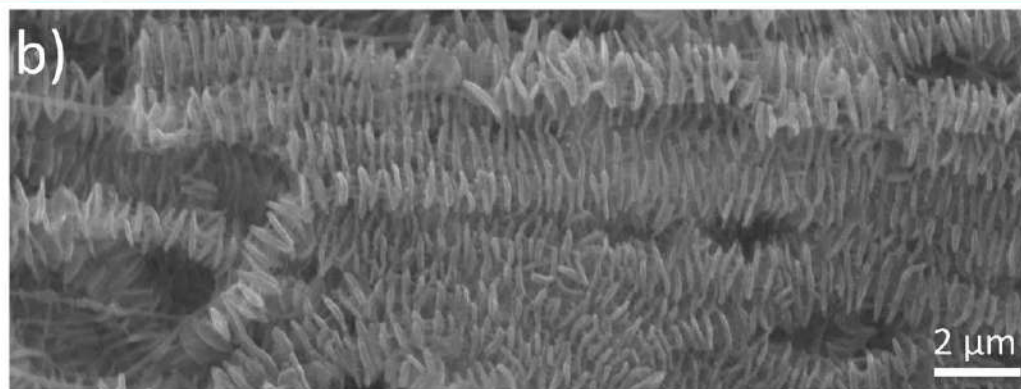
ПАН GF (Великобритания) – сополимер акрилонитрила с метилакрилатом, получаемый радикальной полимеризацией и используемый для производства углеволокна



Пористая структура Шиш-Кебаб, полученная из ориентированных пленок сверхвысокомолекулярного полиэтилена обработкой сверхкритическим CO_2

Лермонтов С.А., Максимкин А.В., Сипягина Н.А. и др.

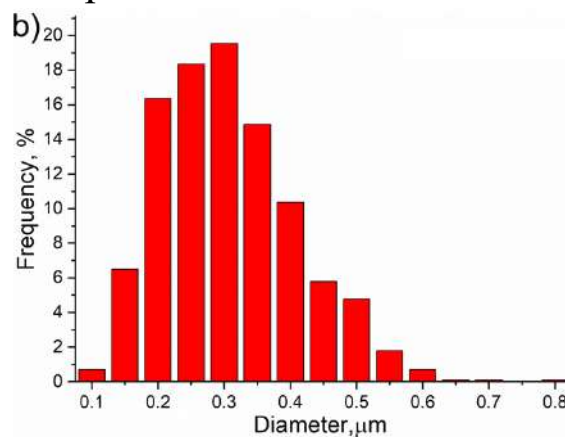
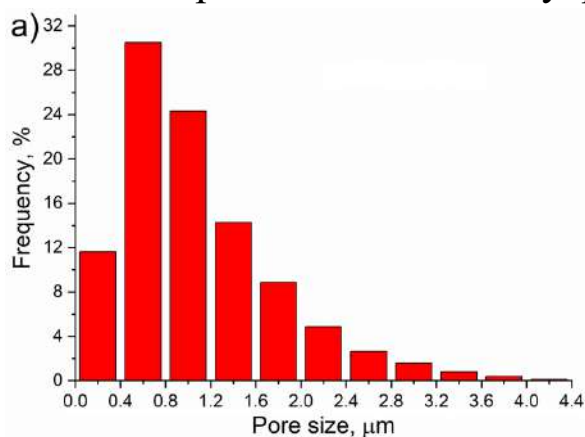
Лаборатория новых синтетических методов ИФЧВ РАН



СЭМ-изображения Кебаба внутри пористой пленки из СВМПЭ.

СЭМ-изображения внешней поверхности пористой пленки СВМПЭ после охлаждения и кристаллизации в сверхкритическом CO_2

Работа проводилась в рамках темкарты 1021062511857-5-1.4.1



Распределение пор по размерам пористых пленок СВМПЭ и б) распределение диаметров Кебабов в структуре Шиш-Кебаб



Физико-химические основы рационального природопользования и охраны окружающей среды на базе принципов «зеленой химии» и высокоэффективных каталитических систем, создание новых ресурсо- и энергосберегающих металлургических и химико-технологических процессов, включая углубленную переработку углеводородного и минерального сырья различных классов и техногенных отходов, а также новые технологии переработки облученного ядерного топлива и обращения с радиоактивными отходами

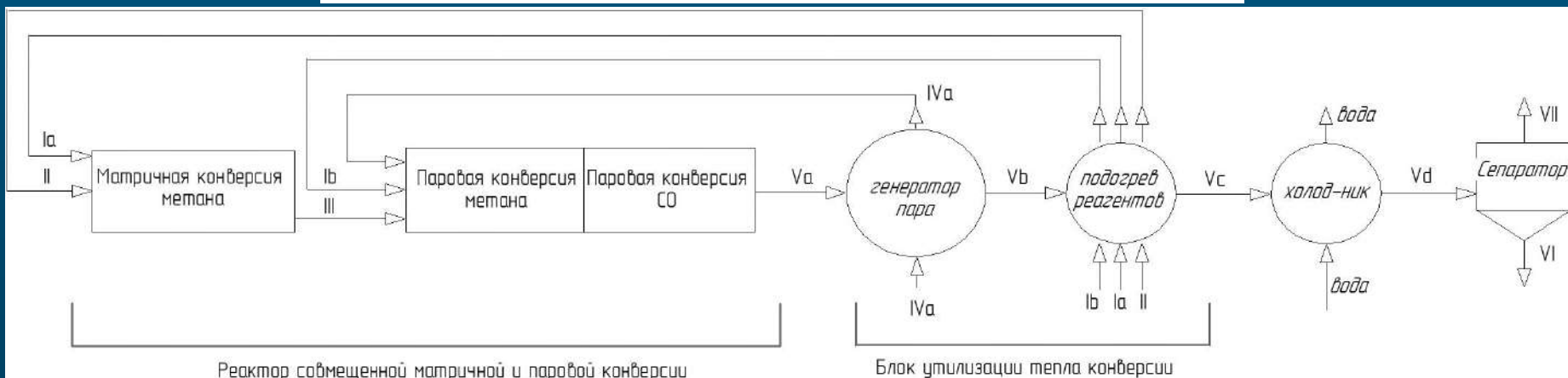
Экспериментальное исследование процесса совмещенной матричной и паровой конверсии природного газа в синтез-газ и водород. Разработка технологической схемы процесса

А. В. Озерский, А. В. Никитин, В. И. Савченко, В. С. Арутюнов, И. Г. Фокин, И. В. Седов
Лаборатория технологии газохимических процессов (ХТО)

Предложен процесс совмещенной матричной и паровой конверсии природного газа в синтез-газ и водород. Выполнена оптимизация технологического процесса.



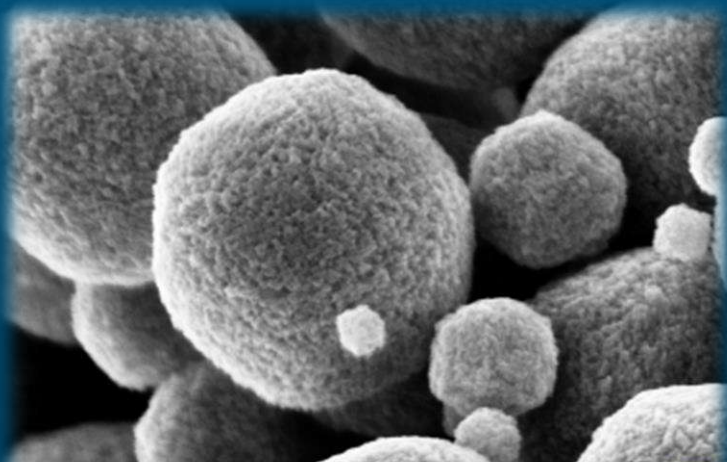
Компонент	Матричная конверсия метана поток Ia (V)		Паровая конверсия метана поток Ib (V)		Синтез-газ после матричной конверсии поток III			Осушенный водородсодержащий газ поток VII		
	нм ³ /ч	кг/ч	нм ³ /ч	кг/ч	%об	V, нм ³ /ч	V, кг/ч	%об	V, нм ³ /ч	V, кг/ч
CH ₄	100	71,4	64	45,7	0,8	4,0	2,8	0,9	6,8	4,9
O ₂					0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N ₂					52,1	257,4	321,7	32,5	257,4	321,7
H ₂					24,9	123,3	11,0	46,5	367,9	32,8
CO					15,6	77,2	96,5	9,6	76,1	95,1
CO ₂					4,1	20,3	39,9	10,4	82,6	162,2
H ₂ O					2,5	12,4	7,3			



Технологическая схема совмещенной матричной и паровой конверсии природного газа в синтез-газ и водород. Ia, Ib – природный газ; II – воздух; III – синтез-газ после матричной конверсии; IVa – вода сырьевая; Va, Vb, Vc, Vd – ВСГ; VI – вода; VII – осушенный ВСГ.



ХИМИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ ПОЛУЧЕНИЯ И ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЭНЕРГИИ, ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В ОБЛАСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ АЛЬТЕРНАТИВНЫХ И ВОЗОБНОВЛЯЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ ЭНЕРГИИ



100 nm EHT = 4.00 kV Signal A = InLenDate :17 Nov 2010 Gun Vacuum = 1.03e-009 mBar
WD = 3 mm Photo No. = 9017Time :16.4528 System Vacuum = 5.20e-007 mBar
Stage at Z = 0.0

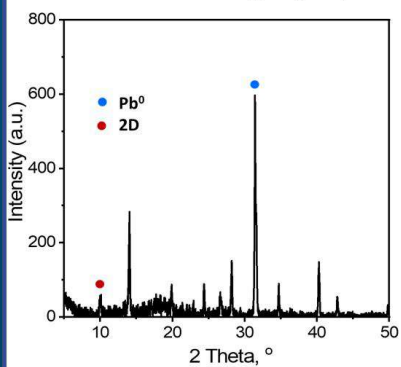
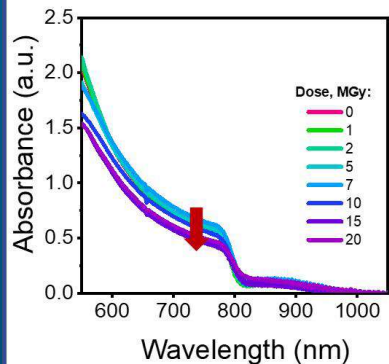




Установлены механизмы деградации комплексных галогенидов свинца под действием гамма-лучей и найдены материалы со сверхвысокой радиационной стойкостью к дозам >10 МГр
 В.В. Озерова, Н.А. Емельянов, Д.П. Кирюхин, П.П. Куц, Г.В. Шилов, Г.А. Кичигина, С.М. Алдошин, Л.А. Фролова, П.А. Трошин

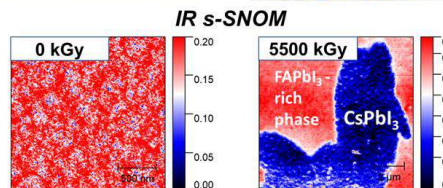
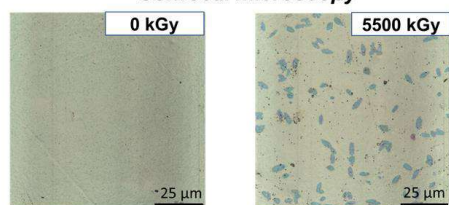
Отдел кинетики и катализа, Комплекс лабораторий ФОГМ;
 Отдел строения вещества, Лаборатория структурной химии

Радиолиз пленок $Cs_{0.12}FA_{0.88}PbI_3$ сопровождается фазовой сегрегацией и образованием металлического свинца

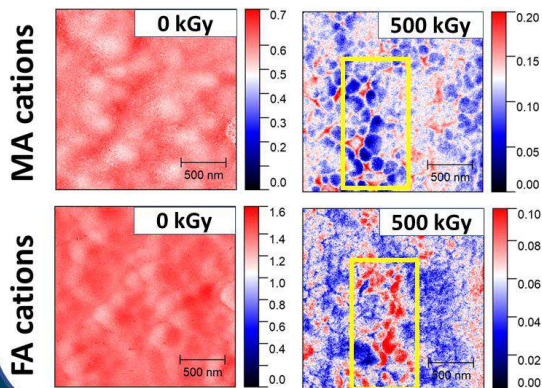


Pb⁰ – металлический свинец,
 2D – перовскитоподобная слоистая фаза типа FA₂PbI₄

Разделение фаз CsPbI₃ и FAPbI₃ в системе Cs_{0.12}FA_{0.88}PbI₃

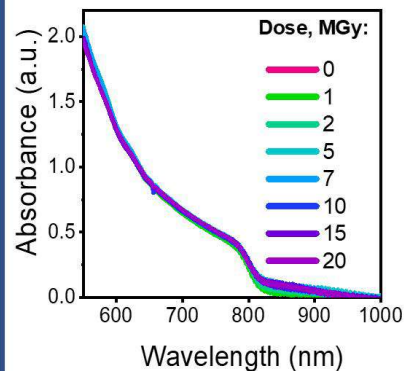


Разделение фаз MAPbI₃ и FAPbI₃ в системе Cs_{0.1}MA_{0.15}FA_{0.75}PbI₃

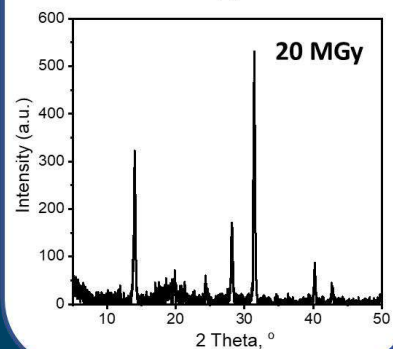


Комплексный галогенид FAPbI₃ демонстрирует высокую радиационную стойкость

Нет изменений в оптических спектрах



Отсутствует образование продуктов радиолиза согласно данным РФА и других методов



- Впервые систематически исследовано поведение комплексных галогенидов свинца с перовскитной структурой в условиях воздействия высоких доз гамма-излучения.
- Установлены основные механизмы гамма-лучевой деградации материалов.
- Обнаружена чрезвычайно высокая радиационная стойкость FAPbI₃, что открывает перспективы для его использования в перовскитных солнечных батареях в космосе и в составе детекторов ионизирующего излучения для медицинской диагностики.



Нейтрализационная проточная батарея с высокой плотностью хранимой энергии и удельной мощностью разряда

П.А. Локтионов, Д.В. Конев, А.Е. Антипов*

Отдел функциональных материалов для химических источников энергии, Лаборатория электродных процессов в жидкостных системах

*РХТУ им. Д.И. Менделеева, г. Москва

Предложена и апробирована перезаряжаемая проточная батарея, запасаящая и воспроизводящая электроэнергию за счет осуществления реакции нейтрализации в водных растворах кислоты и щелочи с образованием соли на мембранно-электродном блоке, включающем два водородных электрода и две ионообменные мембраны, разделяющие растворы кислоты, щелочи и соли. Достигнута рекордная энергоемкость (**48 Вт*ч л⁻¹**) и мощность разряда (**87 мВт см⁻²**) для батареи с 5 М растворами NaOH и HCl.

Процессы, протекающие при разряде:

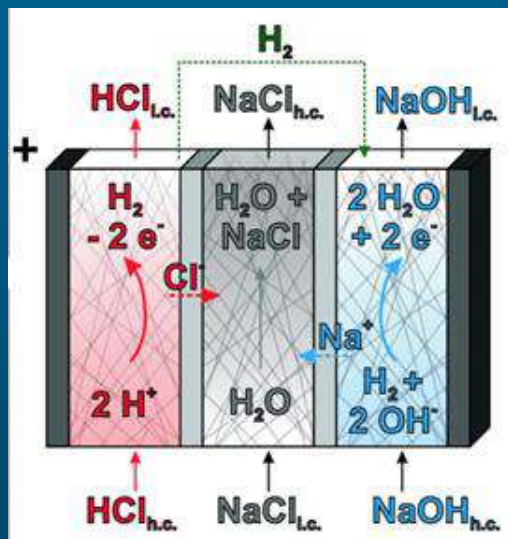


Схема и фотография ячейки нейтрализационной батареи

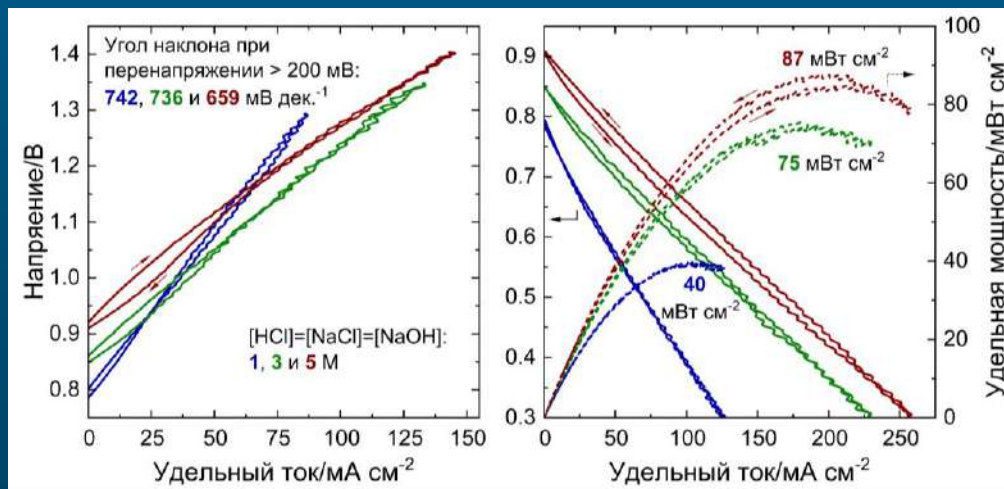
Заряд батареи:

«-» - выделение H₂ в щелочи
«+» - окисление H₂ в кислоте

Разряд батареи:

«-» - окисление H₂ в щелочи
«+» - выделение H₂ в кислоте

✓ Полученные показатели превышают производительность известных нейтрализационных батарей более чем в **3 раза!**





Синтез и исследование нестехиометрических четверных соединений меди $\text{Cu}_{2-\delta}\text{XSnS}(\text{Se})_4$ (где X –элементы групп IIA или VIIIБ) в широком диапазоне δ

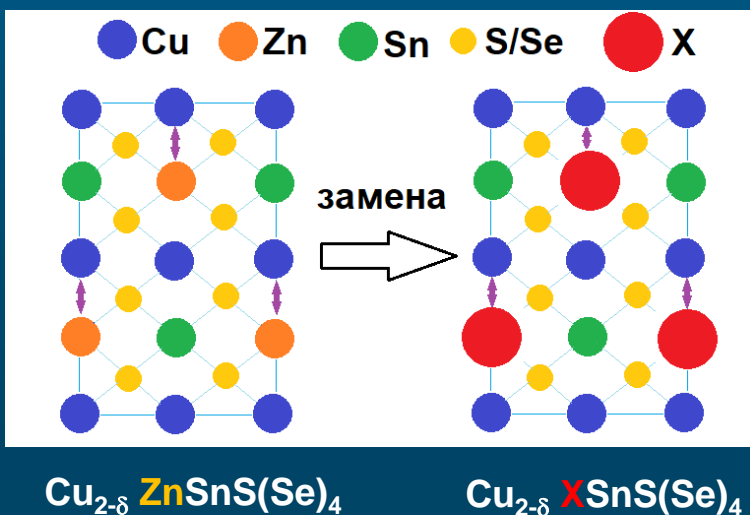
Гапанович М.В., Рабенко Е.В., Ракитин В.В., Голованов Б.И., Тихонина Н.А., Кольцов Е.Н.,
Луценко Д.С.

Отдел нанофотоники, Группа полупроводниковых и композиционных материалов

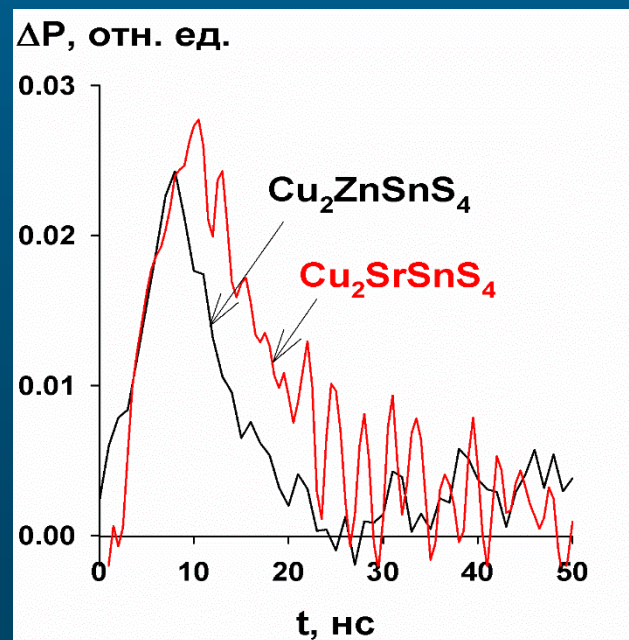
Впервые синтезирован широкий набор нестехиометрических четверных соединений меди $\text{Cu}_{2-\delta}\text{XSnS}(\text{Se})_4$ (где X – элементы групп IIA (Mg, Ca, Sr, Ba) или VIIIБ (Fe, Ni, Co)) в диапазоне $0 \leq \delta \leq 0,4$ - перспективных материалов для тонкопленочных солнечных батарей нового поколения. Исследовано влияние замены атома цинка указанными элементами на структуру и времена жизни фотогенерированных носителей тока (τ). Показано, что такая замена не приводит к существенному изменению τ .

Этапы синтеза $\text{Cu}_{2-\delta}\text{XSnS}(\text{Se})_4$:

- (1) $(2-\delta)\text{Cu} + \text{Sn} + 3\text{S}(\text{Se}) \rightarrow \text{Cu}_{2-\delta}\text{SnS}(\text{Se})_3$
- (2) $\text{X} + \text{S}(\text{Se}) \rightarrow \text{XS}(\text{Se})$
- (3) $\text{Cu}_{2-\delta}\text{SnS}(\text{Se})_3 + \text{XS}(\text{Se}) \rightarrow \text{Cu}_{2-\delta}\text{XSnS}(\text{Se})_4$



Спады микроволновой фотопроводимости





Инжекция и диффузия лития в LiMn_2O_4 в составе анода литий-ионных ХИТ. Измерения релаксации электрохимического шума диффузии и магнетосопротивления

А.Е. Укше, Е.А. Астафьев

ОФМХИЭ, Лаборатория твердотельных электрохимических систем

Предложены два принципиально новых способа исследования процессов транспорта заряда в инжекционных электродах (например, массово применяемых в литий-ионных аккумуляторах): метод анализа электрохимических шумов и релаксация магнетосопротивления материала. Комплекс данных методов дает возможность *in situ* определения лимитирующей стадии распределения заряда в инжекционных электродах, в том числе непосредственно в составе электрохимических устройств.

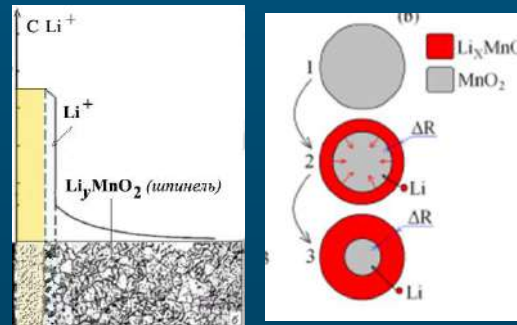
Релаксация в зависимости от времени после инъекции лития в поверхностный слой частиц MnO_2

Математическая модель релаксации электрохимического шума диффузии (1)

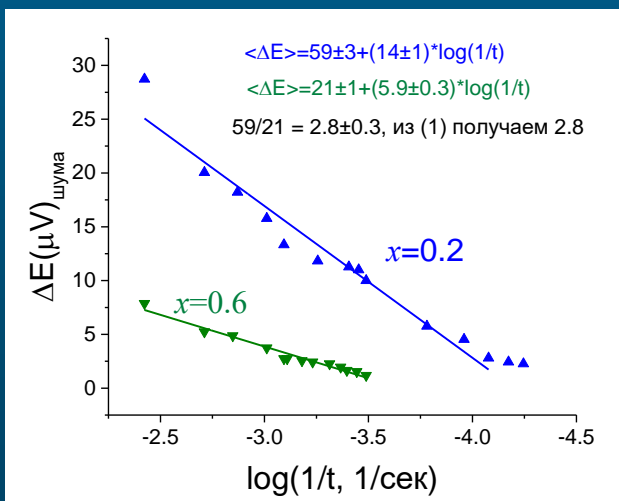
$$\langle \Delta E \rangle \sim D \ln \frac{x^2}{\sqrt{Dt}} = 2D \ln \frac{l}{\sqrt{D}} + \frac{D}{2} \ln \frac{1}{t}$$

магнетосопротивления слоя ионов Li^+ (2)

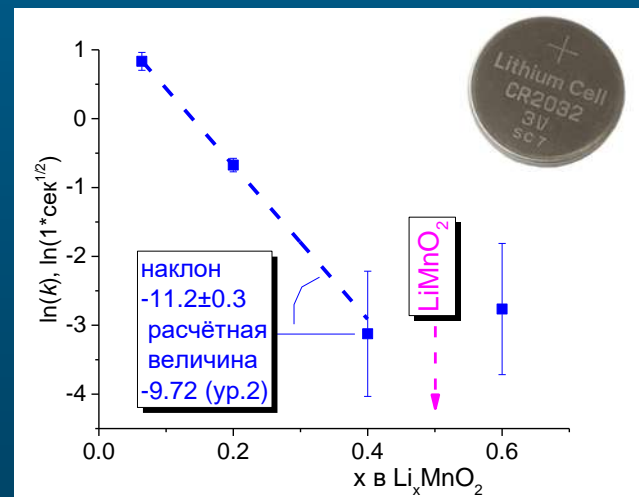
$$\ln(1/k) = \ln \frac{2(\mu B)^2}{\sqrt{\pi D}} \rho_0 \sim \left\{ \ln \left(\frac{2(\mu B)^2}{\sqrt{\pi D}} \right) + 3.24 \right\} y_0$$



Амплитуды шума диффузии для разных степеней разряда. Параметры фиттинга совпадают с (1)



Скорость релаксации k магнетосопротивления (коэффициент в зависимости $R_m = R_0 k t^{-1/2}$ при разных степенях разряда)



Публикации: Укше А.Е., Астафьев Е.А. // *Электрохимия*. 2023. Т.59, № 8, С. 456-464. Q4

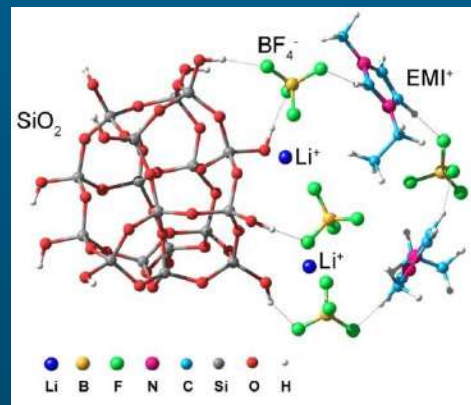
Ukshе А. Е., Astafev Е. А. // *Journal of Solid State Electrochemistry*. 2022. V.26, I.12, P.2765-2770. Q2

Разработка литий-проводящих нанокompозитных электролитов с введением ионных жидкостей

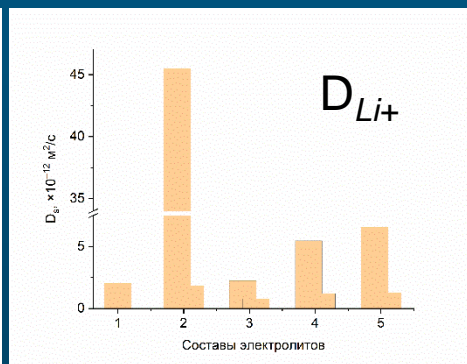
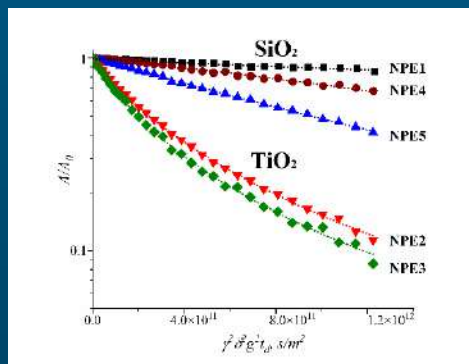
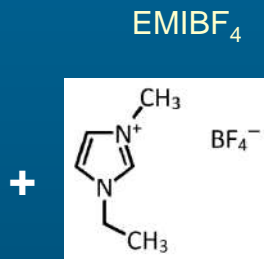
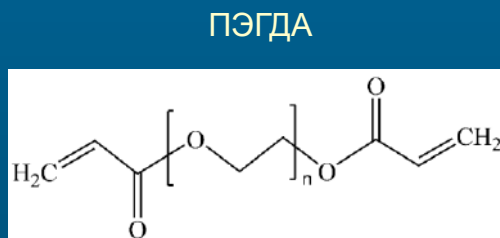
Н.А. Слесаренко, В.И. Волков, А.В. Черняк Лаборатория ЯМР (АЦКП), К.Г. Хатмуллина, Г.Р. Баймуратова, А.В. Юдина, А.А. Слесаренко, Г.З. Тулибаева, А.Ф. Шестаков, О.В. Ярмоленко Лаборатория ЭДЭС (отд. КИК), М.П. Березин (ОПКИМ)

Методом ЯМР установлен механизм ионного и молекулярного транспорта в гель-электролитах на основе ионной жидкости и нанопорошков SiO_2 и TiO_2 , что позволило создать новые безопасные гель-электролиты с высокой проводимостью до 10^{-2} См/см, диапазоном рабочих температур от -40 до 100 °С и термоустойчивостью до 350 °С для литиевых аккумуляторов

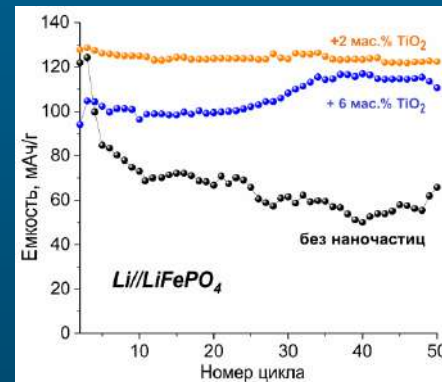
Модель ионных слоев на поверхности наночастиц



Диффузионные затухания на ядрах ^7Li гель-электролитов с добавками наночастиц



Зависимость емкости от количества циклов заряда/разряда



Зависимость коэффициентов самодиффузии на ядрах ^7Li от состава электролитов

K.G. Khatmullina, N.A. Slesarenko, A.V. Chernyak, G.R. Baymuratova, A.V. Yudina, M.P. Berezin, G.Z. Tulibaeva, A.A. Slesarenko, A.F. Shestakov and Olga V. Yarmolenko. // **Membranes** 2023 (Q2)

N.A. Slesarenko, A.V. Chernyak, K.G. Khatmullina, G.R. Baymuratova, A.V. Yudina, G.Z. Tulibaeva, A.F. Shestakov, V.I. Volkov and O.V. Yarmolenko. // **Membranes** 2023 (Q2)



ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ МЕХАНИЗМОВ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ И СОЗДАНИЕ НА ИХ ОСНОВЕ
ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ И ЛЕКАРСТВЕННЫХ
ФОРМ ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ И ПРОФИЛАКТИКИ СОЦИАЛЬНО
ЗНАЧИМЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ

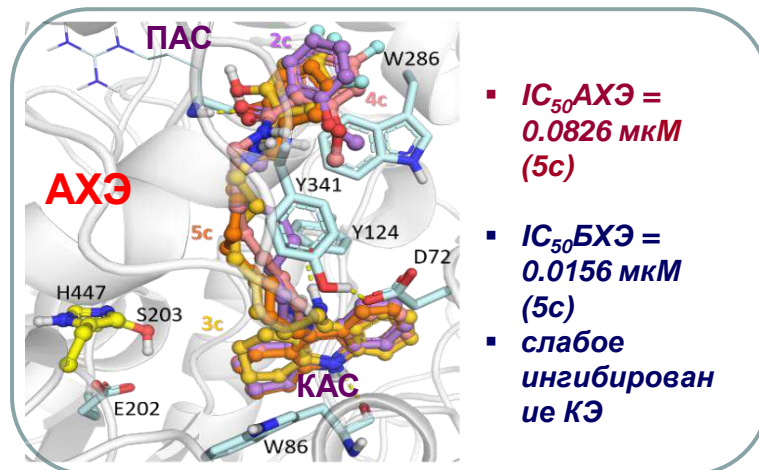
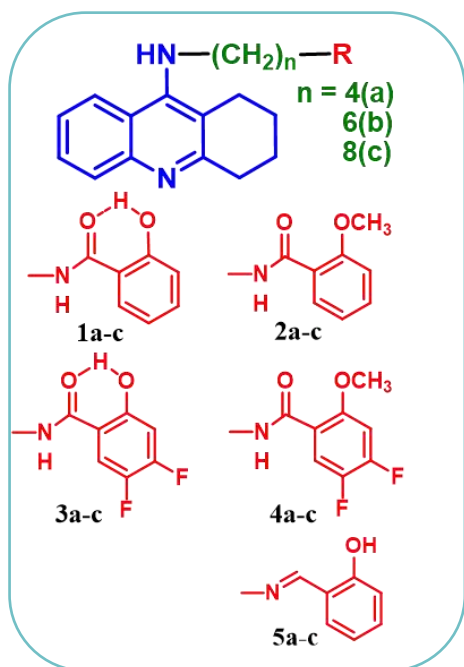


Новые мультифункциональные конъюгаты такрина с производными салициловой кислоты как потенциальные препараты для лечения болезни Альцгеймера.

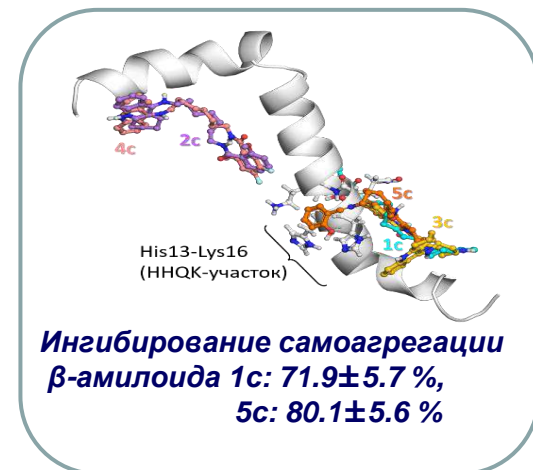
Руководители работы: Махаева Г.Ф., Бачурин С.О., Салютин В.И. (ИОС Уро РАН)

Отдел медицинской и биологической химии ИФВБ РАН
(совместно с Институтом органического синтеза Уро РАН)

- Показано, что новые конъюгаты такрина с производными салициловой кислоты эффективно ингибируют холинэстеразы, проявляют антиоксидантную и металл-хелатирующую активность, а также блокируют АХЭ-индуцируемую и самоагрегацию бета-амилоида.
- Определены соединения-лидеры - конъюгаты 1с и 5с со спейсером $(CH_2)_8$.
- Область практических приложений: разработка и внедрение лекарственных препаратов для лечения нейродегенеративных заболеваний.



- $IC_{50}AXЭ = 0.0826 \text{ мкМ}$ (5с)
- $IC_{50}БХЭ = 0.0156 \text{ мкМ}$ (5с)
- слабое ингибирование КЭ



Ингибирование самоагрегации β -амилоида 1с: $71.9 \pm 5.7 \%$, 5с: $80.1 \pm 5.6 \%$

- ингибирование АХЭ-индуцируемой агрегации β -амилоида
- способность хелатировать биометаллы Cu^{2+} , Fe^{2+} и Zn^{2+}
- высокая антирадикальная активность в тесте ABTS (1а-с и 5а-с)
- предсказанная хорошая кишечная абсорбция и высокая проницаемость через гематоэнцефалический барьер, низкая гепатотоксичность

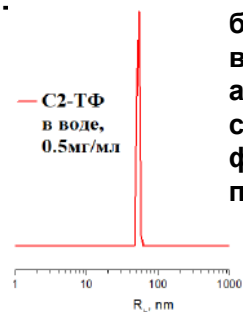
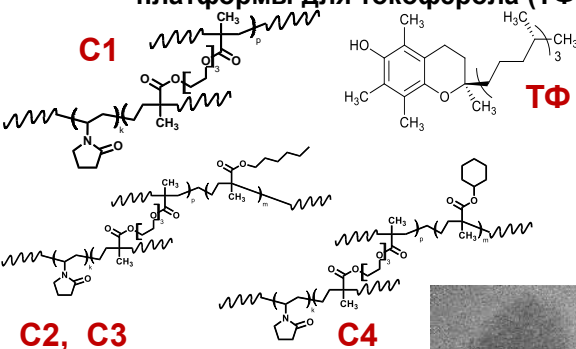
Водорастворимые формы α -токоферола на основе амфифильных сополимеров N-винилпирролидона для биомедицинского применения

Солдатова Ю.В., Курмаз С.В., Полетаева Д.А., Файнгольд И.И.

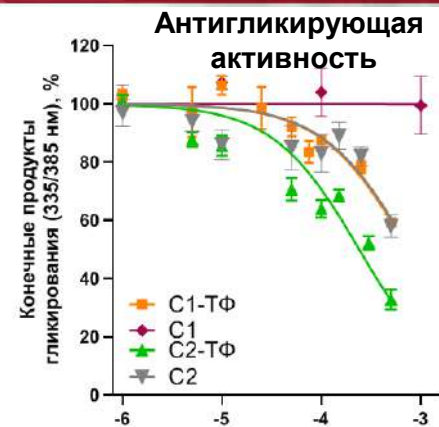
Лаб. физ.-хим. биологии физиологически активных соединений (ОКХиБП)

Лаб. радикальной полимеризации (ОПиКМ)

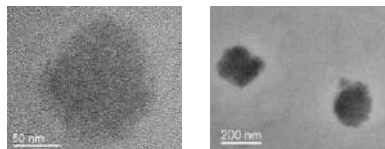
Оригинальные сополимеры N-винилпирролидона с диметакрилатом триэтиленгликоля (C1), алкилметакрилатами - гексилметакрилатом (C2, C3) и циклогексилметакрилатом (C4) - платформы для токоферола (ТФ)



Водорастворимость и амфифильность полученных наноразмерных систем с токоферолом (ТФ) повышают биодоступность токоферола, а наличие выраженных антирадикальных, антиоксидантных и антигликирующих свойств делает их перспективными формами ТФ для биомедицинского применения.

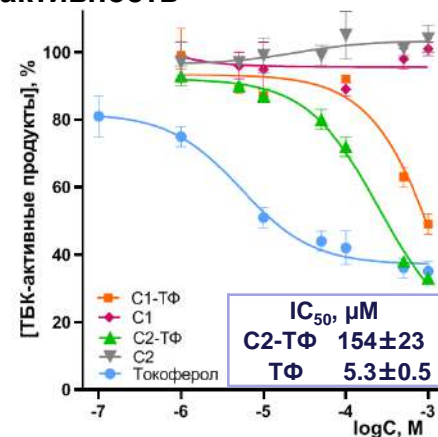
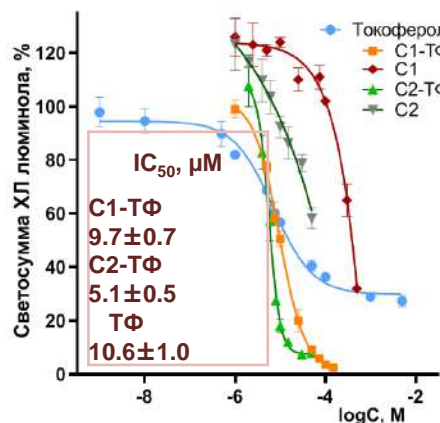


Монодисперсные полимерные наночастицы C2-ТФ, загруженные 3,7% ТФ, размером 100-200 нм в воде



Антирадикальная активность	IC ₅₀ (μM)	ABTS ⁺ -метод	
		ABTS ⁺ -метод	DPRH метод
ТФ	16.0 ± 1.1	16.1 ± 0.8	
C2-ТФ	15.8 ± 0.7	14.4 ± 1.9	
ПВП-ТФ	18.5 ± 1.6	24.4 ± 2.4	
C3-ТФ	26.2 ± 1.5	22.7 ± 1.9	
C4-ТФ	26.8 ± 0.9	21.1 ± 1.9	

Антиоксидантная активность



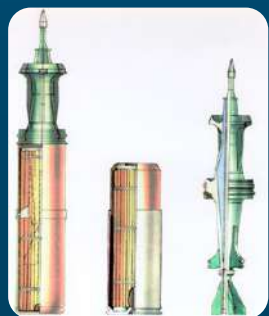
1. Soldatova, Y.V., Faingold, I.I., Poletaeva, D.A., Kozlov A.V., Emel'yanova N.S., Khodos, I.I., Chernyaev D.A., Kurmaz S.V. **Pharmaceutics** 2023. doi:10.3390/pharmaceutics15051388 (Q1)

2. Kurmaz S.V., Perepelitsina E.O., Vasiliev S.G., Avilova I.A., Khodos I.I., Kurmaz V.A., Chernyaev D.A., Soldatova Y.V., Filatova N.V., Faingold I.I. // **International Journal of Molecular Sciences** 2023. doi:10.3390/ijms242015170. (Q1)

3. Курмаз С.В., Фадеева Н.В., Ходос И.И., Емельянова Н.С., Рыбкин А.Ю., Козлов А.В., Сизов Л.Р., Горячев Н.С., Солдатова Ю.В., Полетаева Д.А., Файнгольд И.И. // **Монография «Органические и гибридные наноматериалы: получение, исследование, применение»**, 2023, с. 242-288, глава 7. ISBN 78-5-7807-1432-3.



ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В ОБЛАСТИ ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ В ИНТЕРЕСАХ ОБОРОНЫ И БЕЗОПАСНОСТИ СТРАНЫ



Новые высокоэнтальпийные компоненты энергоемких газогенерирующих конденсированных материалов

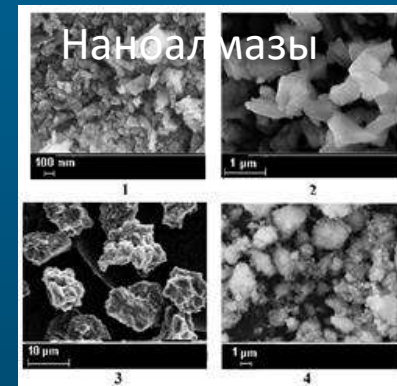
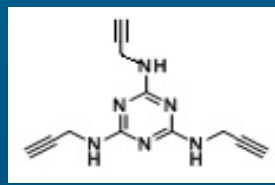
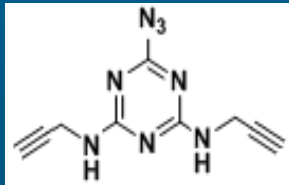
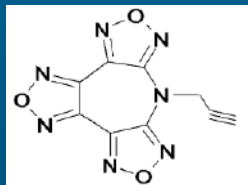
Н.Н. Волкова, А.Ф. Жолудев, М.Б. Кислов, В.В. Разносчиков, Д.Б. Лемперт, В.С. Смирнов, Э.Р. Бадамшина, А.О. Петров, Л.С. Яновский

Отдел горения и взрыва, Отдел полимеров и КМ

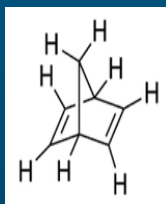
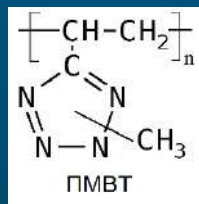
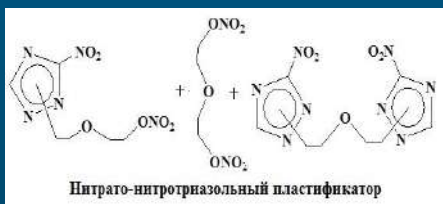
Работа проводилась в рамках темкарты АААА-А19-119100800130-0

Предложены и охарактеризованы новые энергоемкие конденсированные составы на основе высокоэнтальпийных диспергаторов, активных полимерных связующих, высококалорийных пластификаторов и наполнителей. Дальность полета ЛА с ВРД увеличивается в 2 раза по сравнению со штатными ТРТ

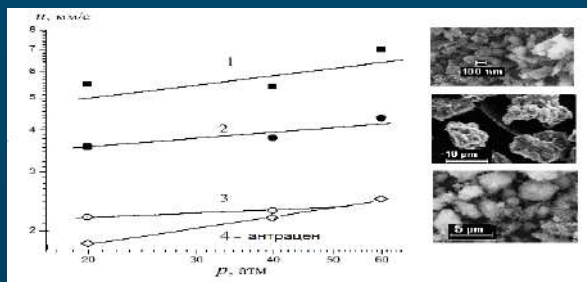
Новые энергоемкие компоненты на основе замещенных триазинов, карборана и наноалмазов



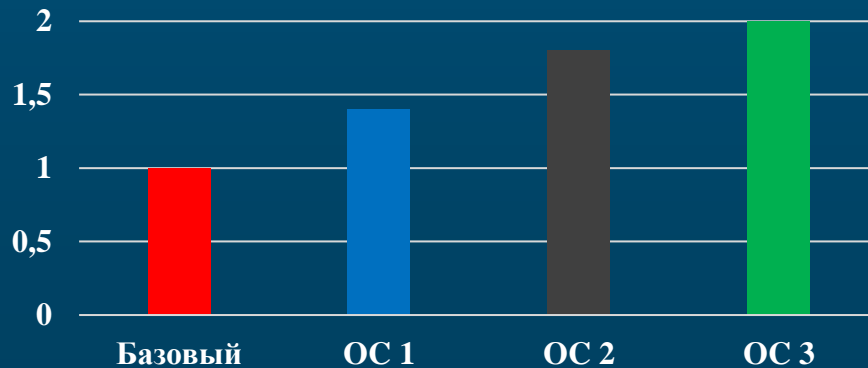
Новые пластификаторы и связующие



Зависимости скорости горения и от доли активного связующего ПМБТ в композициях с диспергаторами



Дальность полета ЛА с ВРД





Прикладные исследования и разработки





Супергидрофобный сорбент для экологической очистки суши и водных объектов от разливов нефти и нефтепродуктов и способ его получения

С.А. Баскаков, Ю.В. Баскакова, С.С. Красникова, Ю.М. Шульга

Группа спектроскопии наноматериалов АЦКП

Изобретение относится к области охраны окружающей среды и может быть использовано для сбора, локализации и утилизации разливов нефти, нефтепродуктов, органических растворителей с поверхности водоемов и твердых поверхностей. Способ получения сорбента заключается в лиофильной сушке замороженного гидрогеля на основе оксида графена и фторопластовой суспензии с дальнейшей термической обработкой для придания композиту супергидрофобных свойств. Аэрогель может быть изготовлен в виде гранул или формованных изделий объемом до 200 см³.

- Сорбент** + имеет практически не ограниченную по времени плавучесть на воде благодаря супергидрофобности (*краевой угол смачивания достигает 169°*),
- + способен впитать до 61 г нефти на 1 г композита.



Патент Рег.№ 2805525. Баскаков С.А., Баскакова Ю.В., Шульга Ю.М., Красникова С.С., Россия.
Опубликовано: 18.10.2023 Бюл. № 29

Окислительная конверсия углеводородов в синтез-газ в рекуперативном реакторе фильтрационного горения типа Swiss roll

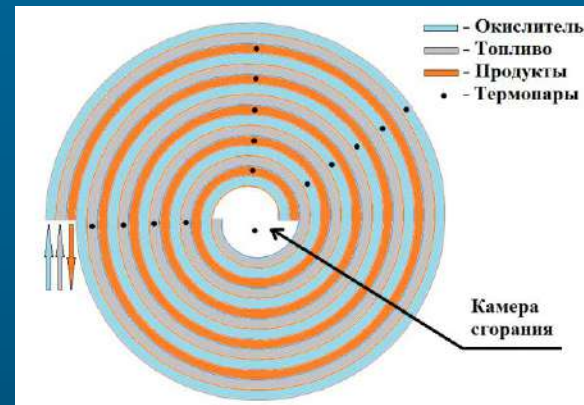
Полианчик Е.В., Дорофеев С.О., Цветков М.В., Подлесный Д.Н., Зайченко А.Ю.

Отдел горения и взрыва, Лаборатория технологического горения

Создана экспериментальная установка на основе реактора типа Swiss roll с отдельным вводом реагентов

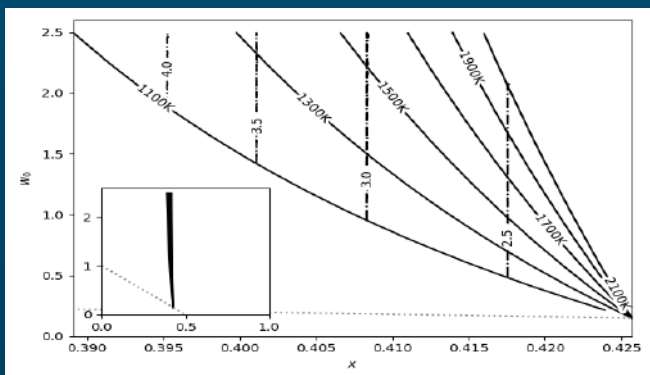


Схема реактора



Рекуперация тепла синтез-газа позволяет достичь близкую к предельной энергетическую эффективность окислительной конверсии метана.

Параметрическая область конверсии (зависимость температуры от $H_2O/CH_4 - O_2/CH_4$).
Термодинамический расчёт.

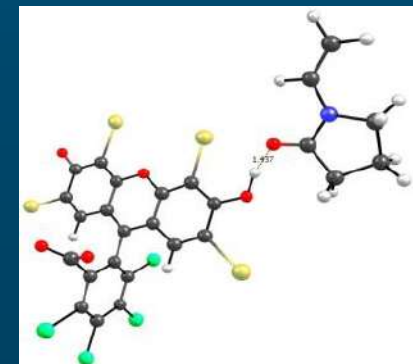
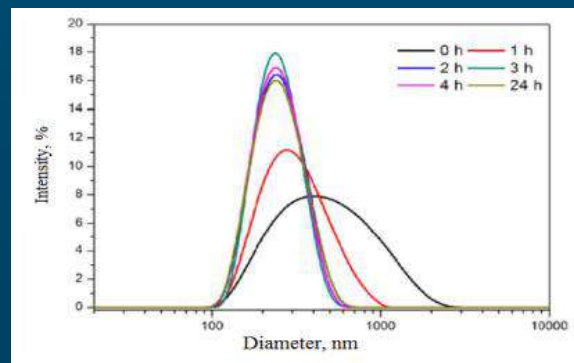
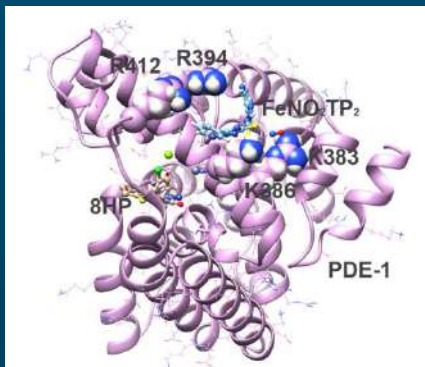


Предложены устройства для практической реализации конверсии углеводородов с рекуперацией тепла:

- 1) Дорофеев С.О. и др. Реактор для горения газов с низким тепловым эффектом реакции. Заявка на изобретение №2023131310; 30.11.2023.
- 2) Дорофеев С.О. и др. Способ получения синтез-газа посредством неполного окисления горючего газа и реактор для его осуществления. Заявка на изобретение №2023131308; 30.11.2023.



*Крупные научные проекты
по приоритетным направлениям научно-
технологического развития в рамках подпрограммы
«Фундаментальные научные исследования для
долгосрочного развития и обеспечения
конкурентоспособности общества и государства»
государственной программы РФ
«Научно-технологическое развитие РФ»*





**Фундаментальные основы спиновых технологий и направленного
конструирования «умных» полифункциональных материалов для спинтроники и
молекулярной электроники**
Руководитель проекта академик С.М. Алдошин

Головная организация

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН

Организации-участники проекта

Институт «Международный томографический центр» СО РАН, г. Новосибирск

Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, г. Москва

Южный федеральный университет, г. Ростов-на -Дону

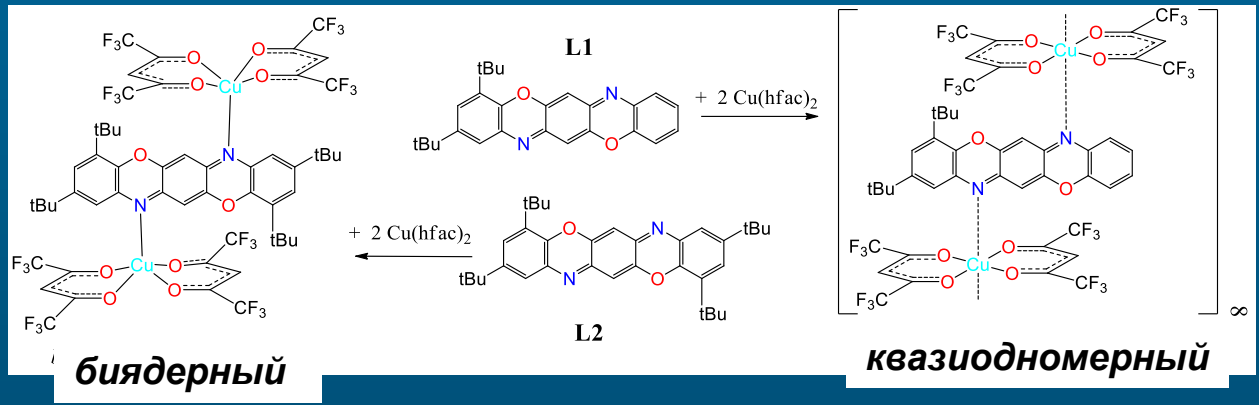
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, г. Москва



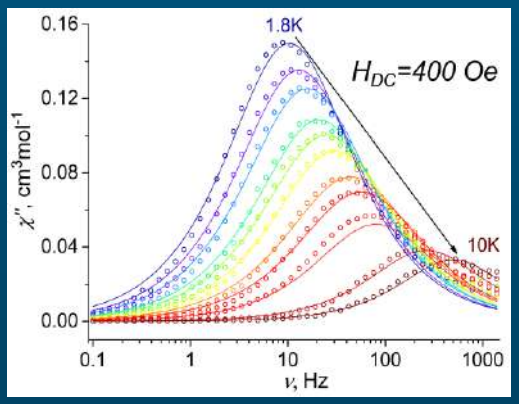
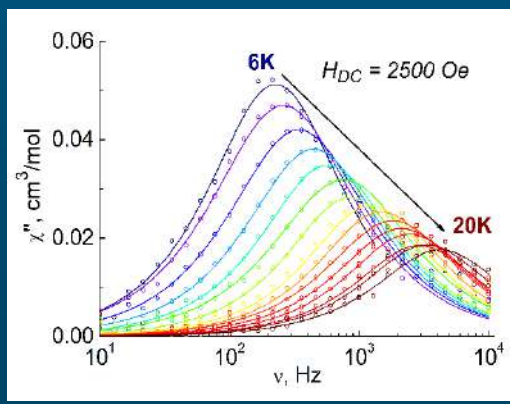
Медленная магнитная релаксация в комплексах меди(II) с пентагетероциклическим трифенодиоксазиновыми лигандами

Д.В. Корчагин, Е.П. Ивахненко, О.П. Демидов, П.А. Князев, Н.Н. Ефимов, Р.Б. Моргунов, А.Г. Стариков, А.В. Палий, В.И. Минкин, С.М. Алдошин
ФИЦ ПХФ и МХ, ЮФУ, ИОНХ РАН

“Фундаментальные основы спиновых технологий и направленного конструирования “умных” полифункциональных материалов для спинтроники и молекулярной электроники” (рук. акад. С.М. Алдошин) 075-15-2020-779



В зависимости от заместителей трифендиоксазиновых лигандах в одних и тех же условиях в реакции с бисгексафторацетилацетонатом меди(II) образуются либо бидерные комплексы, либо комплексы с квазиодномерной структурой, в которых отсутствует координационная связь Cu-N.



Оба комплекса Cu(II), несмотря на отсутствие расщепления в нулевом магнитном поле и $S = 1/2$, демонстрируют индуцируемую полем медленную магнитную релаксацию, причем для квазиодномерного комплекса при рекордно низком среди всех моноионных магнитов на основе ионов металлов со $S=1/2$ приложенном поле 400Э.



Медицинская химия в создании лекарств нового поколения для лечения социально-значимых заболеваний

Головная организация

Институт органического синтеза им. И.Я. Пастера УрО РАН, г. Екатеринбург

Организации-участники проекта

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, г. Москва

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН

Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова СО РАН, г. Новосибирск

Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова Казанского научного центра РАН, г. Казань

Волгоградский государственный медицинский университет Минздрава России, г. Волгоград

Уникальная структура и свойства нитрозильного комплекса железа – донора оксида азота, ингибитора фосфодиэстеразы 1

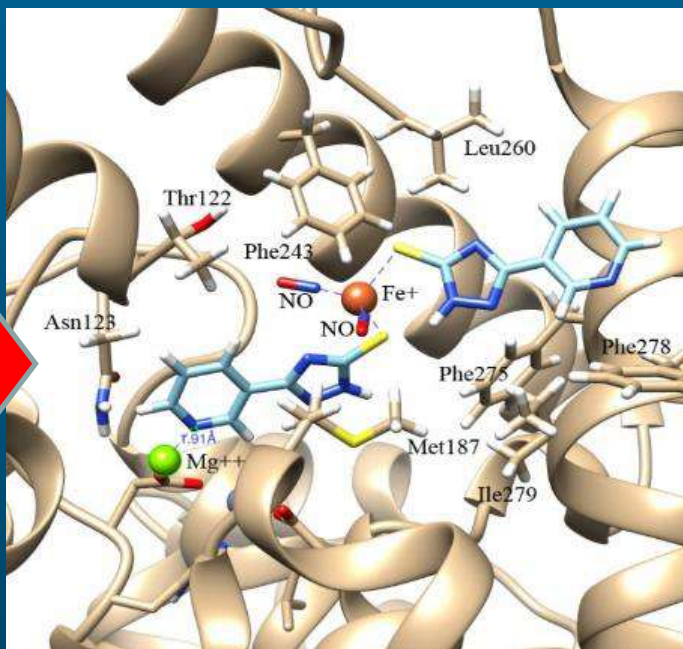
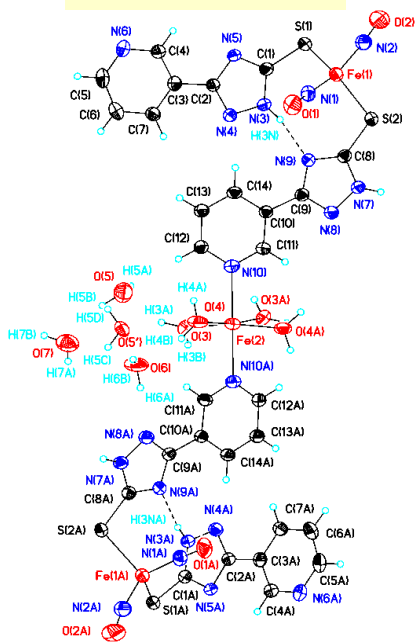
Н.А. Санина, А.Н. Утенышев, Н.С. Ованесян, А.В. Куликов, В.В. Лужков, О.В. Покидова, С.М. Алдошин

ФИЦ ПХФ и МХ РАН, ОСВ, ОКХиБП

Область практического приложения: химиотерапия инфекционных заболеваний (противовоспалительные агенты).

Работа выполнена в рамках проекта «Медицинская химия в разработке препаратов нового поколения для лечения социально значимых заболеваний» (№ 075-15-2020-777).

Молекулярная структура комплекса



□ Показано, что комплекс является в 5–6 раз более эффективным ингибитором фосфодиэстеразы (ФДЭ) в концентрациях 5×10^{-5} М и 10^{-4} М (76%; 60%), чем его тиолиганд (18%, 17%) и превосходит активность классического ингибитора ФДЭ – препарата теофиллина (63%; 45%).

□ С помощью молекулярного докинга и квантово-химических расчетов определены вероятные места связывания основного продукта гидролиза комплекса - $[\text{Fe}(\text{C}_7\text{H}_6\text{N}_4\text{S})_2(\text{NO})_2]^-$ для модели бычьей ФДЭ1В.

Продукт разложения комплекса - $[\text{Fe}(\text{C}_7\text{H}_6\text{N}_4\text{S})_2(\text{NO})_2]^-$ в активном сайте бычьей ФДЭ 1

$\{[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_4]_2^+[\text{Fe}(\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_4\text{S})_2(\text{NO})_2]_2^{2-}\} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$

Публикации:

➤ N.A. Sanina, A.N. Utenyshev, P.V. Dorovatovskii, N.S. Ovanesyan, A.V. Kulikov, I.V. Sulimenkov, V.B. Luzhkov, O.V. Pokidova, S.M. Aldoshin, // **Dalton transactions** - 2023. - 52. - 18090 - 18101 (Q1) DOI:10.1039/D3DT03104G

➤ Н.А. Санина, А.Н. Утенышев, О.В. Покидова, С.М. Алдошин, // **Заявка на патент**. Регистрационный номер - 2023124185.

Дата поступления в ФИПС - 20.09.2023.



Материалы для микроэлектроники

Проект технологического суверенитета

Головная организация

АО НИИ Молекулярной электроники

Организации-участники проекта

ФГУП ГНЦ Научно-исследовательский институт полупродуктов и красителей (НИОПИК)

ООО «Поликетон»

АО «Микрон»

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН

Руководитель работ в ФИЦ ПХФ и МХ РАН Э.Р. Бадамшина

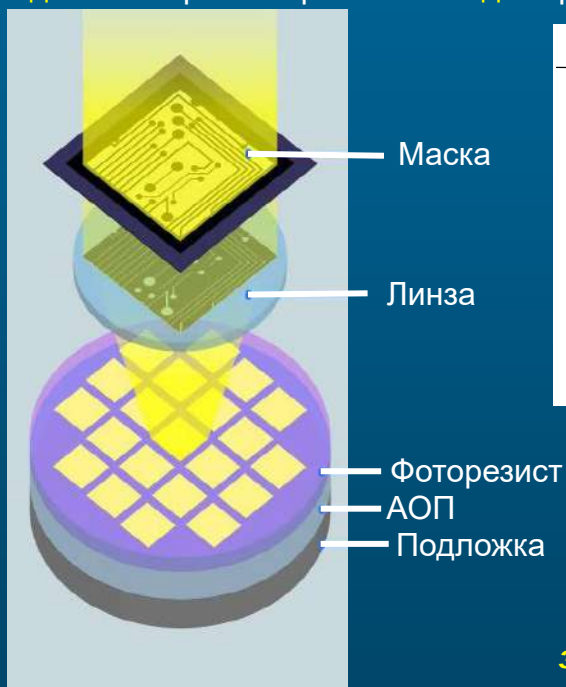
Ответственный исполнитель Г.В. Малков

Усовершенствованные методы получения компонентов для фоторезистов с химическим усилением

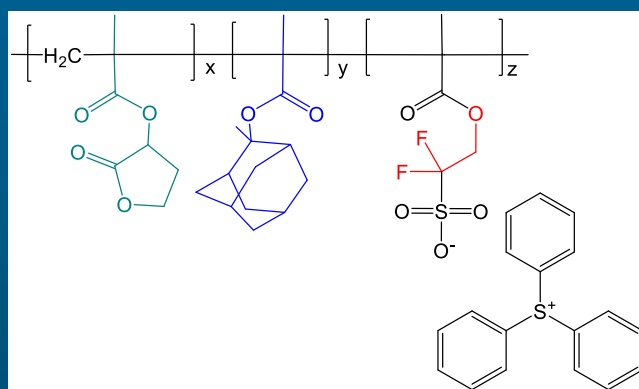
И.Е. Кузнецов, Д.С. Заморецков, А.С. Новиков, М.Е. Сидельцев, А.В. Аккуратов

Отдел полимеров и композиционных материалов
Лаборатория фоточувствительных и электроактивных материалов

Разработаны простые и масштабируемые методы получения **фотогенераторов кислот** – сульфониевых и йодониевых фотосолей, **а также ряда мономеров** – эфиров метакриловой кислоты на основе адамантана, **являющихся** важнейшими компонентами для создания фоторезистов с химическим усилением. Область практических приложений: изготовление **изделий** микроэлектроники **методом** фотолитографии.

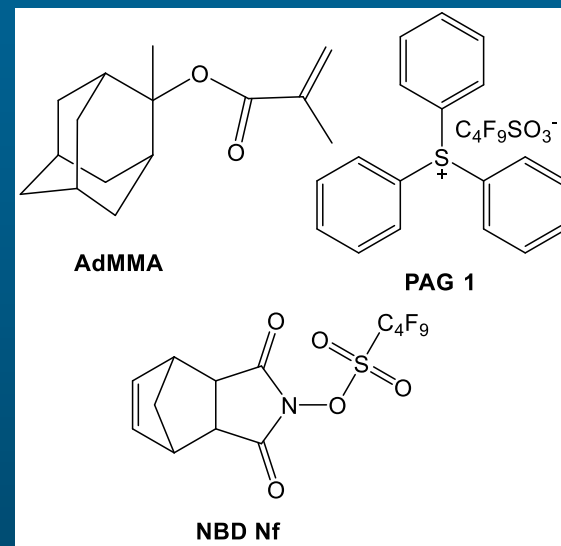


Схематическое изображение процесса фотолитографии



**Фоточувствительный полимер –
основной компонент
фоторезиста с химическим
усилением**

**Проведенная работа позволила
значительно упростить синтез и
повысить выход продуктов, что
является важным условием для их
наработки в пилотных и далее в
полупромышленных установках.**



**Успешно решена задача по разработке
простых и масштабируемых методов
получения фотогенераторов кислоты и
мономеров для синтеза полимерной
основы современных фоторезистов**

Пример работы Центра компетенции

Испытательный стенд технологий хранения и компримирования водорода в арктическом контейнерном исполнении, водородных спасательных БПЛА и переносных водородных зарядных станций

*Чуб А.В., Шиховцев А.В., Кузьмин М.Н., Галин М.З., Королев Д.В., Левченко А.В., Добровольский Ю.А.
Центр НТИ, ОФМХИЭ*

В рамках договора с МФТИ был создан ряд опытных образцов систем водородной энергетики:

- образец беспилотного летательного аппарата мультироторного типа малой размерности с энергоустановкой на основе топливных элементов:
 - Взлетная масса – до 30 кг;
 - Полезная нагрузка – до 5 кг;
 - Время полета до 120 минут.



- образец гибридной системы хранения водорода с системой заправки баллонов высокого давления:
 - Общий объем хранимого водорода - 150 Нм³;
 - Давление заправки – до 350 бар;
 - Скорость заправки – до 4 Нм³/час;
 - Обеспечения автоматикой контроля и безопасности работы.



- образец переносной зарядной станции на основе топливных элементов и химического генератора водорода:
 - Выходная мощность – до 20 Вт;
 - Тип генератора водорода – гидролизный;
 - Общая энергоемкость – 500-700 Вт*ч;

«ЦИФРОВОЙ ДВОЙНИК» ГОРЕЛОЧНОГО УСТРОЙСТВА РЕАКТОРА ПАРОГАЗОВОГО РИФОРМИНГА «ТАНДЕМ»

Султанов В.Г., Размыслов А.В., Седов И.В., Никитин А.В.
ОЭСБ, ХТО



Цель работы:

Создание **цифрового двойника** горелки реактора парокислородного риформинга для реинжиниринга блока аппаратов установки «Тандем»

Результат работы:

- создана **цифровая модель** горелки реактора с параметрами процессов горения: распределением концентрации, температуры, давления, скорости потоков продуктов горения при штатной работе,
- произведен расчет аварийных и переходных режимов (перегрев элементов конструкции, возможная детонация при самовоспламенении смеси прогретой ниже 700 °С, самовоспламенение смеси, прогретой выше 700 °С).
- рассчитаны условия возникновения аварийных ситуаций, даны рекомендации по предотвращению.

Научная новизна и практическая значимость работы:

- детально исследована работа горелочного устройства в точной геометрии: структура течения парокислородной и парогазовой смеси; структура обтекания и роль паровой защиты форсунок; тепловое состояние элементов форсунки при работе в штатном режиме и возможных нештатных режимах работы.
- получены данные по форме, размерам и длинам зон пламени, зон выгорания окислителя и распределение всех участвующих в реакциях компонент смеси.
- проведено моделирование возможных критических моментов при процедуре запуска: определены локальные условия воспламенения при смешивании в зоне горения парогазовой и парокислородной смеси; возможные аварийные ситуации;
- расчет произведен с использованием облачных вычислительных ресурсов



**Мегагрант Правительства РФ
для поддержки научных исследований
№ 075-15-2022-1126**

Тема: «Металлогидридные технологии: от материалов к водородным системам хранения и преобразования энергии»

Лаборатория металлогидридных энерготехнологий

Заведующий лабораторией Лотоцкий М.В.

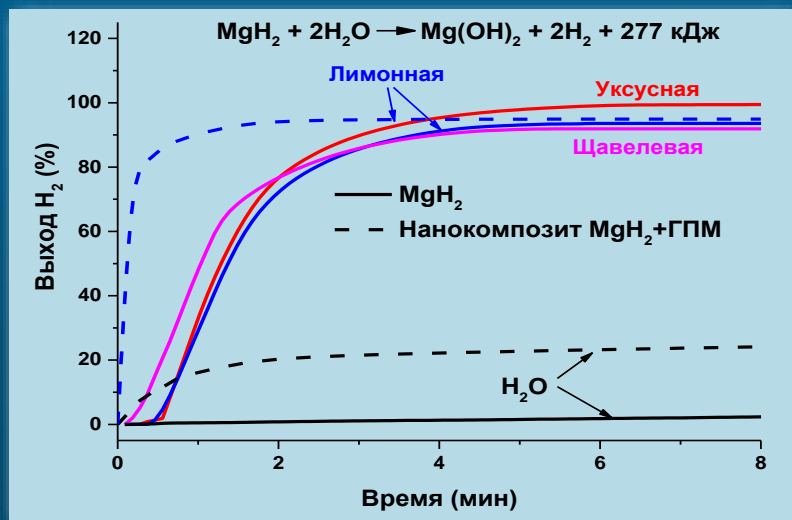
Разработка водород-генерирующих материалов на основе гидрида магния и компрессора водорода гидролизного типа

М.В. Лотоцкий, А.А. Арбузов, С.А. Можжухин, Б.П. Тарасов

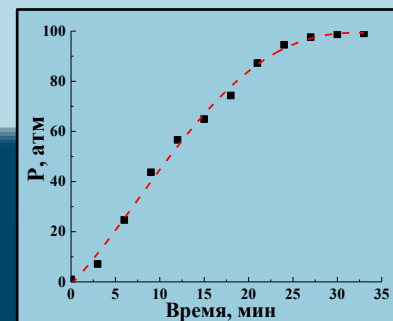
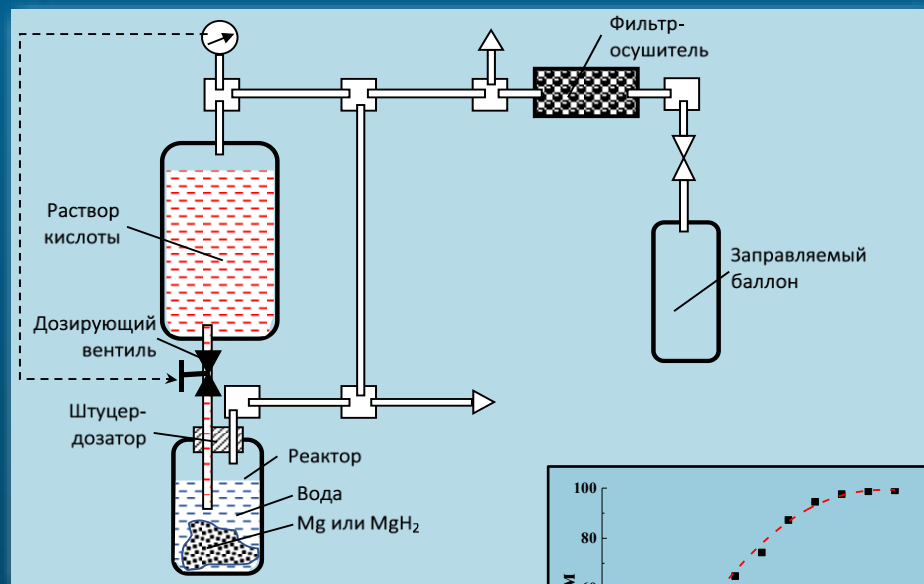
Лаборатория металлгидридных энерготехнологий
Комплекс лабораторий водородного материаловедения

Выявлены закономерности протекания реакций выделения водорода при взаимодействии MgH_2 и его композитов с водными растворами органических кислот и определены оптимальные составы водород-генерирующих материалов. Разработан и испытан прототип автономного генератора водорода гидролизного типа, позволяющий получать водород высокого давления.

Зависимости выхода водорода от времени при гидролизе MgH_2 и его композита с графеноподобным материалом (ГПМ) в воде и 3% растворах уксусной, щавелевой и лимонной кислот



Генератор водорода высокого давления



Патент: № 2735285 «Способ получения компримированного водорода и устройство для его осуществления» от 29.10.2020
авторы: Арбузов А.А., Шимкус Ю.Я., Можжухин С.А., Сон В.Б., Тарасов Б.П.

Публикации:

- М.В. Lototsky, М.В. Davids, Т.К. Sekgobela, А.А. Arbuzov, С.А. Mozzhukhin, Y. Zhu, R. Tang, В.Р. Tarasov. *Inorganics*. 2023. V. 11. P. 319. <https://doi.org/10.3390/inorganics11080319> (Q2)
- А.А. Арбузов, С.А. Можжухин, М.В. Лотоцкий, Б.П. Тарасов. *Журнал прикладной химии*. 2023. Т. 96. Вып. 2. С. 217.

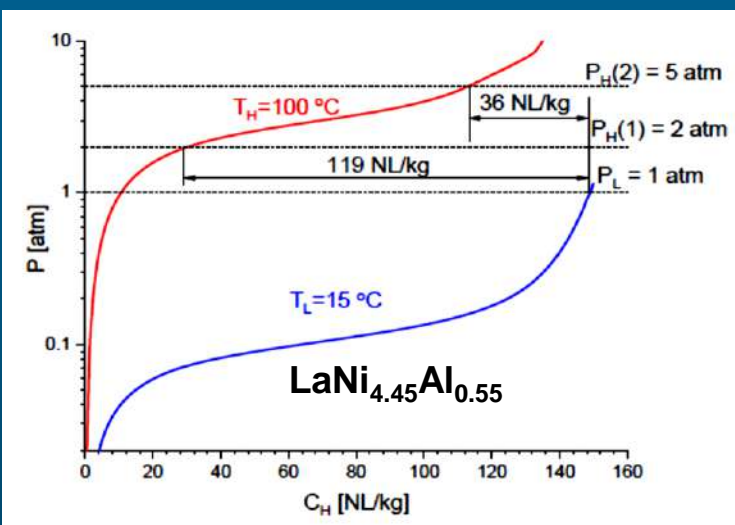


Разработка материалов и накопителей-компрессоров водорода низкого давления

Б.П. Тарасов, А.А. Арбузов, С.А. Можжухин, А.А. Володин, П.В. Фурсиков, М.В. Лотоцкий

Комплекс лабораторий водородного материаловедения
Лаборатория металлгидридных энерготехнологий

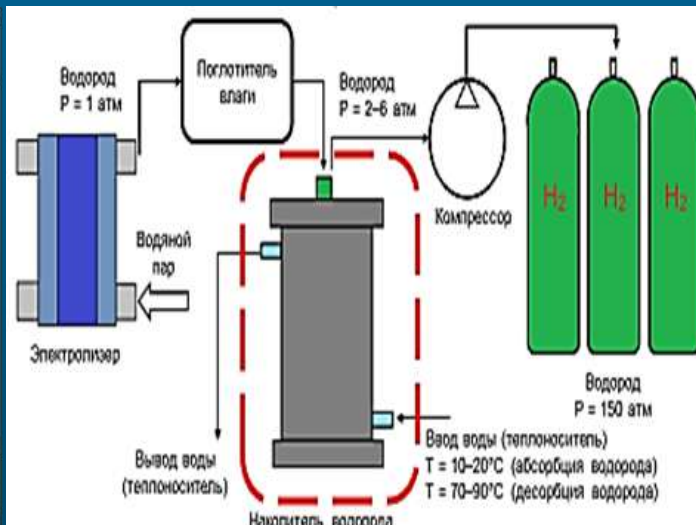
Разработаны композиты на основе интерметаллидов $\text{LaNi}_{5-x}\text{Al}_x$ и Ni-графеновых материалов, поглощающие водород под давлением ниже 1 атм при 15-25°C и выделяющие водород под давлением 5-9 атм при 80-120°C. Созданы металлгидридные накопители-компрессоры водорода емкостью 1 м³, поглощающие водород из твердооксидного электролизера под давлением 1 атм при комнатной температуре и выделяющие водород при нагреве до 80–120°C под давлением 5-9 атм для последующего сжатия поршневым компрессором.



Изотермы абсорбции ($T_L=15^\circ\text{C}$) и десорбции ($T_H=100^\circ\text{C}$) водорода разработанными композитами



Разработанный накопитель-компрессор водорода низкого давления (слева) и в интеграции с электролизером и компрессором водорода (справа)



Патент РФ на полезную модель № 220568. Металлгидридный аккумулятор водорода низкого давления многократного действия /

авторы: Тарасов Б.П., Арбузов А.А., Можжухин С.А., Володин А.А., Фурсиков П.В., Лотоцкий М.В.

Публикация: В. Tarasov, A. Arbuzov, S. Mozhzhukhin, A. Volodin, P. Fursikov, M.W. Davids, J. Adeniran, M. Lototsky. // **Inorganics**. 2023, 11, 290. <https://doi.org/10.3390/inorganics11070290> (Q2)

Внедрение: ИФТТ им. Ю.А.Осипьяна



С наступающим Новым годом!

*Пусть Новый 2024 год будет для Вас
Годом новых творческих свершений.*

***Доброго здоровья,
благополучия в семье Вам и
Вашим близким.***

