

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр химической физики
им. Н.Н. Семенова Российской академии наук
Совет молодых ученых

СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ
IX ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ
МОЛОДЕЖНОЙ ШКОЛЫ-КОНФЕРЕНЦИИ
«ХИМИЯ, ФИЗИКА, БИОЛОГИЯ:
ПУТИ ИНТЕГРАЦИИ»

Москва
20–22 апреля 2022 года

УДК 50(063)
ББК 2я431

Сборник тезисов докладов IX Всероссийской научной молодежной школы-конференции «Химия, физика, биология: пути интеграции». 20–22 апреля 2022 года. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН), Москва, Россия. — Москва: Издательство ФГАОУ ВО Первый МГМУ им. И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский Университет), 2022. — 224 с.

ISBN 978-5-6045579-5-2

IX Всероссийская научная молодежная школа-конференция «Химия, физика, биология: пути интеграции» организована Советом молодых ученых ФИЦ ХФ РАН (СМУ ФИЦ ХФ РАН).

Основная цель конференции — развитие взаимодействия между научными коллективами ФИЦ ХФ РАН и другими научно-исследовательскими организациями, ВУЗами России.

Основной задачей конференции является поиск междисциплинарных проблем и возможностей их решения путем проведения совместных исследований.

В 2022 году основу научной программы составили устные доклады молодых ученых, аспирантов и студентов по следующим направлениям:

1. Новые материалы: технологии создания и методы исследования;
2. Физико-химические процессы, кинетика и термодинамика;
3. Компьютерное моделирование и теория наносистем;
4. Биохимия, биофизика, биотехнология и биомедицина.

Третий год подряд неотъемлемой частью конференции стали пленарные доклады ведущих российских молодых ученых, в том числе молодых докторов наук.

Конференция проводилась в очном формате Федеральным государственным бюджетным учреждением науки Федеральным исследовательским центром химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук.

ISBN 978-5-6045579-5-2



В настоящей работе рассматривается поведение периферически и непериферически замещенных двухпалубных фталоцианинатов лантанидов с феноксильными фрагментами, полученных путем темплатной конденсации замещенного фталонитрила и ацетата неодима в расплаве. Стоит отметить, что феноксизамещенные комплексы обладают повышенной растворимостью в органических растворителях. В работе изучено влияние размера иона лантанида в результате окислительно-восстановительных превращений. Для этого к приготовленному в толуоле раствору заданной концентрации комплекса был добавлен гидразин-гидрат, который инициировал redox-реакцию. Для процесса были получены кинетические кривые, для начального прямолинейного участка были построены зависимости $\ln(c_0/c)$ от времени τ , что позволило рассчитать эффективную константу процесса. Наибольшее значение $k_{\text{эфф}}$ принимает макроцикл с наибольшим ионным радиусом лантанида. Увеличение ионного радиуса лантанида приводит к возрастанию расстояния между фталоцианиновыми лигандами, что вероятно благоприятствует контакту реакционного центра макроцикла и восстановителя.

ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВОГО РАССЛОЕНИЯ В СИСТЕМЕ NI-NB ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Доронина М.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.

Казанский федеральный университет, Казань, Россия

Изучение конденсированных сред в определенных экстремальных условиях позволяет лучше понять механизмы микроскопических структурных превращений и разработать материалы с совершенно новыми механическими свойствами.

В настоящей работе изучены структура и кинетика кристаллизации объемного металлического стекла (ОМС) $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$. Мы показываем, что этот ОМС быстро кристаллизуется под совместным действием сдвиговой деформации и сверхвысокого давления. Выявлено пороговое давление, необходимое для инициирования образования стабильной кристаллической фазы. Сдвиговая деформация и высокое давление приводят к фазовому разделению: образуются две неоднородные кристаллические структуры высокой плотности. Мы обнаружили, что кристаллизация этого ОМС происходит в две стадии из-за существенной разницы в скоростях роста кристаллических фаз Ni и Nb (см. рисунок 1).

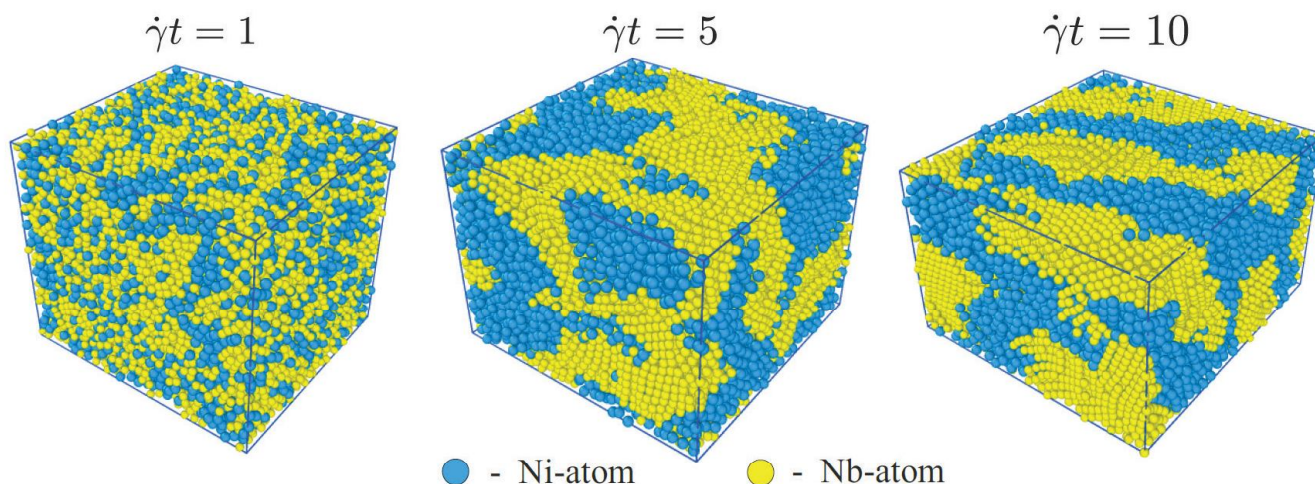


Рис. 1. Мгновенные снимки системы при различных степенях деформации и при давлении 600 GPa.

Из рисунка 1 видно, что фазовое расслоение отчетливо проявляется при высоких давлениях (более 400 ГПа) и при деформациях больше единицы. Рост каждой фракции происходит как за счет присоединения отдельных атомов Ni или Nb, так и за счет слияния мелких кристаллитов.

Слияние зародышей приводит к образованию неоднородной кристаллической структуры, характерной для фазового расслоения. Отметим, что подобное диффузионное перераспределение компонентов с изменением кристаллической структуры наблюдается во многих многокомпонентных сплавах, испытывающих фазовые превращения.

Например, распад спинодального типа и образование наноразмерной композитной структуры наблюдались ранее в сплавах Cu-Co и LiFePO_4 при деформации кручением под высоким давлением.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №19-12-00022).