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
9 785604 557952

© СМУ ФИЦ ХФ РАН, 2022.

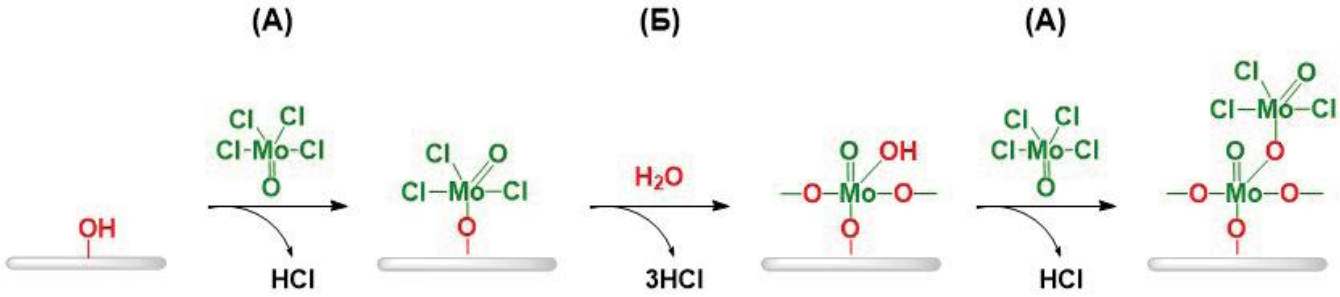

Рис. 1. Схема возможных поверхностных процессов взаимодействия паров $MoOCl_4$ и H_2O в процессе АСО MoO_x при 150 °С.

С целью более детального исследования поверхностных реакций проведены квантово-химические расчеты термодинамических параметров (ΔG) реакций А и В при трех указанных выше температурах. Расчёты были проведены негибридным методом PBE/DFT с функциональным базисом def2-TZVP, использовались кластерные модели молибденсодержащих структур различной функциональности. Для расчетов использовали кластерную модель поверхности SiO_2 на основе сечения <111> с параметрами

β-кристобалита (в качестве псевдоатомов использовали атомы Н). Анализ расчетных данных подтвердил данные КПМ и показал максимальный энергетический выигрыш для монодентатных реакций на поверхности.

Работа выполнена в рамках Государственного Задания FZNZ-2020-0002.

ПОРИСТЫЕ БИОСОВМЕСТИМЫЕ СПЛАВЫ И ПРОБЛЕМЫ ИХ ИССЛЕДОВАНИЯ

Галимзянов Б.Н., Никифоров Г.А., Мокшин А.В.

Казанский федеральный университет, Казань, Россия

В настоящее время пористые сплавы находят широкое применение в различных областях, например, в имплантологии и протезировании, в производстве электродов для аккумуляторных батарей, для производства топливных контейнеров, микроскопических фильтрующих элементов, различных датчиков и элементов радиоэлектроники. К наиболее перспективным относятся биосовместимые сплавы с эффектом памяти-формы, которые являются основными материалами для развития биоинженерии и энергетики будущего. Среди таких сплавов широко известным является нитинол (сплав $Ni_{50}Ti_{50}$), который обладает наиболее благоприятными функциональными свойствами, по сравнению с другими сплавами.

Существует несколько методов производства пористых металлических сплавов, в том числе, пористого нитинола. Самым популярным является метод спекания порошков микронного размера, позволяющий получать пористые образцы с пористостью порядка 55 %. Однако при спекании порошков нитинола могут образоваться так называемые вторичные фазы Ti_2Ni и $TiNi_3$, которые являются очагами для формирования трещин. Наличие таких фаз может сильно повлиять на результаты механических испытаний: снижаются прочностные свойства пористого сплава.

В компьютерном моделировании для получения пористого нитинола с кристаллической структурой применяется метод вырезания пор с использованием компьютерных алгоритмов. В отличие от экспериментальных методов синтеза пористых материалов, моделирование также позволяет получать аморфный пористый сплав. Как правило, здесь применяется метод изохорного охлаждения и метод инъекции газа в жидкий расплав. Преимущество методов компьютерного моделирования заключается в возможности управления параметрами пористой структуры, такими как пористость, линейные размеры пор, геометрия и распределение пор в объеме системы.

Одной из главных проблем в моделировании пористого нитинола является получение пористой структуры, где распределение и геометрия пор будут соответствовать параметрам пор экспериментального образца. На эксперименте образцы миллиметрового размера, в то время как в моделировании это порядка ста нанометров. Для решения этой проблемы нами предложен критерий масштабирования пористой структуры, который через моделирование позволяет получить пористую структуру, близкую к структуре экспериментальных образцов. Согласно этому критерию, отношение между средним линейным размером пор и линейным размером системы должно совпадать с таким же отношением, рассчитанным для экспериментального образца. Мы находим, что использование данного критерия масштабирования позволяет корректно сопоставлять результаты моделирования и эксперимента для пористых образцов с различной степенью пористости.

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